

Министерство  
образования  
и науки  
Российской  
Федерации

Федеральное  
государственное  
автономное  
образовательное  
учреждение  
высшего  
образования  
Московский  
физико-  
технический  
институт  
(государственный  
университет)



60

60-я  
НАУЧНАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ  
МФТИ

Москва,  
Долгопрудный,  
Жуковский  
2017

# ТРУДЫ 60-Й ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ МФТИ

20-26 ноября  
2017 года

Нано-, био-,  
информационные, когнитивные  
и социогуманитарные науки  
и технологии

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего  
образования «Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»

Труды  
60-й Всероссийской научной  
конференции МФТИ

20 - 26 ноября 2017 года

Нано-, био-, информационные, когнитивные  
и социогуманитарные науки и технологии

Москва Долгопрудный Жуковский  
МФТИ  
2017

УДК 004.81:004.9:3  
ББК 32.813  
Т78

Т78            **Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ.**  
20–26 ноября 2017 г. Нано-, био-, информационные, когнитивные  
и социогуманитарные науки и технологии. -  
М.: МФТИ, 2017. - 50 с.  
ISBN 978-5-7417-0655-8

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Статьи представляют интерес для специалистов, работающих в области нано-, био-, информационных, когнитивных и социогуманитарных наук и технологий.

**УДК 004.81:004.9:3**  
**ББК 32.813**

**ISBN 978-5-7417-0655-8**

© Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)», 2017

## Оглавление

Программный комитет конференции.....	5
Организационный комитет конференции.....	6
<b>Секция информатики и вычислительных сетей.....</b>	<b>7</b>
<i>А.В. Бычков, Е.А. Доренская.</i>	
Подход к минимизации количества программных ошибок в алгоритмических модулях, разработка «языка описания проблем» .....	7
<i>А.Е. Грязев, В.С. Архипкин</i>	
Генерация обучающих выборок для СНС.....	9
<b>Секция математики и математических методов физики .....</b>	<b>12</b>
<i>А.И. Аллилуева, А.И. Шафаревич</i>	
Линеаризованные решения волнового уравнения на простейших графах .....	12
<i>А.Ю. Аникин, С.Ю. Доброхотов</i>	
Квазимоды для псевдодифференциальных уравнений с нетривиальным субглавным символом и приложение к уравнению массового графена.....	12
<i>Ю.В. Брежнев, С.Ю. Доброхотов, А.В. Цветкова</i>	
Интегрируемые в эллиптических функциях уравнения для фронтов линейных волн на воде, порожденных локализованным источником.....	13
<i>П.Н. Петров, С.Ю. Доброхотов</i>	
Асимптотика решения уравнения Гельмгольца в трехмерном слое переменной толщины с локализованной правой частью .....	14
<b>Секция НБИК-технологий .....</b>	<b>15</b>
<i>Д.А. Лапкин, А.В. Емельянов, А.А. Ступников, В.А. Демин</i>	
Миниатюризация органических мемристивных элементов на основе полианилина с использованием оптической литографии.....	15
<i>М.А. Галченкова, П.М. Готовцев</i>	
Аспекты резистентности молекулы ДНК.....	15
<i>Р.В. Шариков, Т.Х. Тенчурин</i>	
Разработка и исследование нетканых волокнистых биосовместимых материалов на основе поликапролактона .....	16
<i>О.Е. Сварник, И.А. Нажесткин</i>	
Исследование вариабельности нейронной активности в ретроспленальной коре головного мозга крыс в процессе приобретения нового поведения.....	18
<i>К.Г. Антипова, Т.Е. Григорьев, К.И. Луканина, С.В. Крашенинников, В.Г. Мамагулашвили, А.Д. Шепелев</i>	
Исследование равномерности механических свойств волокнистых нетканых материалов .....	20
<i>А.В. Колчин, Ф.В. Кашаев, А.В. Скобелкина</i>	
Рассеяние света и фотолюминесценция в кремниевых наночастицах, формируемых методами электрохимического травления и лазерной абляции в жидкости .....	22
<i>Л.П. Суханов, Р.Г. Чумаков, А.В. Горячевский, В.Г. Станкевич</i>	
Исследование электронных и электрических свойств полярной молекулы C <sub>60</sub> F <sub>18</sub> для описания её адсорбции на Au(111) .....	23

<i>Е.С. Кормазева, А.А. Анциферова</i>	
Изучение биокинетики наночастиц диоксида титана в организме лабораторных крыс	25
<i>З.А. Носовец, В.А. Орлов, В.Л. Ушаков, А.А. Пойда</i>	
Создание 3D-атласа в МNI-координатах, основанного на функциональной парцелляции коры и внутренних структур головного мозга человека	26
<i>Т.С. Земскова</i>	
О параметрах импульса тока для активации релаксационного порогового интегратора	28
<i>И.А. Суражевский</i>	
Моделирование токов утечки в выполненном на основе мемристового нанокompозита $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ кросс-баре типа 1Т1М	29
<i>Е.Я. Подоляк, А.В. Кедров, А.А. Лазуткин, Г.Н. Ениколопов</i>	
Влияние мемантина на гиппокампальный нейрогенез у взрослых животных после облучения	31
<i>А.Ш. Ибрагимова, А.В. Недолужко, С.М. Расторгуев</i>	
Разработка молекулярных методов видовой идентификации осетровых с помощью SNP-генотипирования	32
<i>К.Э. Никурий, А.В. Емельянов, В.А. Демин, В.В. Рыльков</i>	
Изучение мемристовых свойств нанокompозита $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$	33
<b>Секция физики и физического материаловедения</b>	<b>36</b>
<i>Д.С. Яковлев, Д.С. Львов, О.В. Скрыбина, В.С. Столяров</i>	
Эффект Джозефсона в гибридных структурах сверхпроводник-топологический изолятор-сверхпроводник на основе наноразмерных монокристаллов $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$	36
<i>Д.В. Амасев, С.В. Попов, А.Г. Казанский, С.А. Козюхин, В.Г. Михалевич</i>	
Фотоэлектрические и оптические свойства металлоорганических перовскитов на основе галогенидов свинца	37
<i>Г.С. Сергеев, В.Г. Орлов</i>	
Особенности распределения электронной плотности в халькогенидах висмута, пниктидах железа, купратах и в родственных им сверхпроводниках	39
<i>Д.А. Чернодубов, А.В. Инюшкин</i>	
Практическая реализация метода «3-омега» для исследования теплопроводности тонких плёнок	42
<i>Ш.Р. Саитов, Д.В. Амасев, А.Р. Тамеев, В.В. Малов, В.М. Светличный, Л.А. Мягкова, А.Г. Казанский</i>	
Проводимость и фотопроводимость тонких пленок полимера - производного полифенилхинолина	43
<i>А.Л. Барабанов, О.А. Титов</i>	
Сила отдачи от нейтринного излучения при захвате электронов поляризованными ядрами	45
<i>А.В. Маширов, В.В. Коледов, А.П. Каманцев, В.Г. Шаэров</i>	
Характерные температуры метамагнитоструктурного фазового перехода в сплавах Гейслера системы Ni-Mn-In	46

---

---

## Программный комитет конференции

---

---

*Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель*

*В.А. Баган, директор по развитию – заместитель председателя*

*А.А. Воронов, проректор по учебной работе и довузовской подготовке*

*А.В. Дворкович, директор ФРКТ*

*В.В. Киселев, директор ФФПФ*

*С.С. Негодяев, директор ФАКТ*

*В.В. Иванов, директор ФЭФМ*

*А.М. Райгородский, директор ФПМИ*

*С.В. Леонов, директор ФБМФ*

*П.К. Кашкаров, директор ИНБИКСТ*

---

---

## Организационный комитет конференции

---

---

*М.В. Милов, руководитель направления «Образование» ЦУП – председатель*

*С.О. Русскин, представитель ФРКТ*

*Е.Ю. Чиркина, представитель ФФПФ*

*Ю.О. Алексеева, представитель ФАКТ*

*В.Б. Макарова, представитель ФАКТ*

*В.А. Яворский, представитель ФЭФМ*

*С.А. Зайцев, представитель ФЭФМ*

*Е.Г. Молчанов, представитель ФПМИ*

*В.Н. Логинов, представитель ФПМИ*

*К.А. Коньков, представитель ФПМИ*

*К.И. Агладзе, представитель ФБМФ*

*В.Г. Орлов, представитель ИНБИКСТ*

*М.В. Костелева, представитель УНЦ ГСН*

*А.С. Гунаисова, начальник пресс-службы*

*Е.Д. Жебрак, директор аналитического центра*

---

---

## Секция информатики и вычислительных сетей

---

---

УДК 004.43

### **Подход к минимизации количества программных ошибок в алгоритмических модулях, разработка «языка описания проблем»**

*А.В. Бычков, Е.А. Доренская.*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В современном мире все большее количество задач выполняется при помощи компьютерных технологий и робототехники, однако стоит помнить, что все алгоритмы и программы управления написаны человеком. А человеку, как известно, свойственно делать ошибки.

В данной работе рассматривается подход к минимизации числа ошибок в программном коде. На сегодняшний день существуют способы отслеживания программных ошибок (code-checkers) и методики по более безошибочному написанию кода (правила Хольцмана), однако они не позволяют достичь стопроцентной эффективности. Даже одна допущенная ошибка в десятке тысяч строк кода дублируется во все приложения, которые используют этот фрагмент программы. Поэтому в качестве возможного решения в данной работе предлагается идея отдаления человека от процесса написания программ и создания «языка описания проблем». Это язык программирования, в котором пользователю не нужно самостоятельно составлять алгоритмы для решения задач. Вместо этого требуется сформулировать четкое описание необходимой задачи, и программа, используя имеющиеся в ее распоряжении алгоритмические модули, самостоятельно собирает код.

Стоит понимать, что все модули нового языка будут так же написаны человеком, то есть не будут застрахованы от ошибок. Как вариант решения этой проблемы предлагается использовать «метод множества глаз». Этот метод заключается в том, что вероятность наличия в программе ошибок обратно пропорциональна количеству ее использований. В качестве примера можно рассмотреть функцию  $\sin(x)$ . Она проверена на огромном разнообразии значений в невероятном количестве пользовательских задач, что позволяет утверждать, что ошибки в этом модуле маловероятны.

Для минимизации программных ошибок в используемых модулях создается банк алгоритмов на базе проекта OpenSource. Пользователи смогут использовать содержащиеся в банке алгоритмы для решения собственных задач, что увеличит вероятность нахождения ошибок, а также смогут вносить коррективы и добавлять новые модули.

Структура банка алгоритмов:

- Id – идентификационный номер алгоритма;
- Name – наименование;
- Language – язык программирования, на котором написан код модуля;
- Libraries – необходимые подключаемые библиотеки и инструкции ; по их установке;
- Input – входные параметры;
- Output – выходные параметры;
- Author – автор алгоритма;
- creation\_date – дата создания;
- URL – ссылка на депозитарий, в котором хранится код модуля;
- user\_description – текстовое описание для пользователя. Это поле требуется для облегчения поиска по банку, позволяя программисту быстрее понять функционал каждого модуля;



- `comp_description` – описание модуля для программы. Для того, чтобы «Язык описания проблем» мог осуществлять поиск модулей по банку, необходимо, чтобы каждый модуль содержал описание своего функционала, и чтобы программа была способна его понять;
- `URL_updates` – ссылка на депозитарий с обновлениями программных модулей. Имеет смысл хранить несколько последних версий каждого из модулей, на случай если в процессе модификации возникнут ошибки и потребуется восстановить предыдущую версию. Также более старые версии алгоритмов можно использовать для решения более специфических задач;
- `Examples` – ссылки на примеры использования программного модуля.

Банк алгоритмов может принести пользу даже вне контекста задачи, описанной в данной работе. Благодаря использованию «метода множества глаз», большого количества пользователей и свободного доступа, банк будет содержать программные модули, тем более надежные, чем больше раз они использовались. Перед помещением алгоритма в банк так же следует проверять его на наличие ошибок используя другие методы (`code-checkers`, правила Хольцмана, оценка по модели Миллса [3], [5]).

Следующим шагом станет разработка экспертной системы подбора алгоритмов. Пользователь сможет сформулировать программе свою задачу и получить в качестве ответа один или несколько программных модулей, с помощью которых эта задача может быть частично или полностью решена. Программа в диалоговом режиме уточняет предметную область, точность формулировки и другие параметры. Предпринимается попытка разделения сложной задачи на подзадачи, после чего осуществляется поиск модулей для решения этих подзадач. Если же необходимого программного модуля в банке не находится, предпринимается попытка составления нового, или же программисту предлагается написать свой с последующей возможностью помещения его в банк.

На этом шаге, однако, возникают определенные сложности. В идеале задача должна быть описана на естественном языке, русском или английском, с последующим преобразованием его в язык высокого уровня. Здесь возникает проблема интерпретации, так как естественный язык содержит множество выражений, которые можно интерпретировать неоднозначно. Так же не стоит исключать вероятность ошибки в формулировке задачи.

Первой попыткой решения проблемы автоматической генерации программы служит модуль Е.А. Доренской для генерации регулярных выражений путем диалога программист–программа. Модель путем задавания пользователю наводящих вопросов на выходе способна выдать необходимое пользователю регулярное выражение [7].

На данный момент ведется разработка банка алгоритмов для последующего его запуска и наполнения программными модулями. Разработана программа, которая путем ведения диалога с пользователем способна составить необходимое регулярное выражение. Ведется поиск решения проблемы контекста и начальная разработка экспертной системы.

## Литература

1. Когда компьютеры станут умнее человека // *Chip*. 2009. С. 24–25.
2. <https://geektimes.ru/post/286304/>
3. [http://book.itep.ru/10/holz\\_rules.htm](http://book.itep.ru/10/holz_rules.htm)
4. *Иванников В.П. [и др.]*. Статический анализатор *Svace* для поиска дефектов в исходном коде программ // Труды Института системного программирования РАН. 2014. Т. 26, № 1. С. 231–250.
5. <https://habrahabr.ru/post/122912/>
6. *Cousot P.* Handbook of Theoretical Computer Science Methods and logics for Proving Programs // 1990. Elsevier Science Publishers B.V. P. 844.
7. *Е.А. Доренская*. Формирование регулярного выражения посредством диалога программист–программа. Авторское свидетельство RU 2017619074.

УДК 004.021

## Генерация обучающих выборок для СНС

*А.Е. Грязев, В.С. Архипкин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для многих практических приложений полезно знать последовательность системных вызовов, которая породила данное дерево процессов в операционной системе. Например, это является важной подзадачей в проекте CRIU [1].

Программа, составляющая эту последовательность, принимает на вход таблицу, содержащую информацию об идентификаторах всех процессов (PID), идентификаторах родителей этих процессов (PPID) и идентификаторов их сессий (SID).

Решение этой задачи является вычислительно сложным. Поэтому для её упрощения было предложено обнаружить закономерности во входных данных, используя методы машинного обучения, в частности СНС.

Для обучения СНС было необходимо сгенерировать обучающие выборки (таблицы с параметрами процессов), которые использовались нашим научным руководителем для конструирования сверточных фильтров входного слоя НС.

Авторами были сгенерированы таблицы с фиксированным максимальным числом процессов равным шести, при этом число процессов варьировалось от 2 до 6. Алгоритм генерации этих выборок был основан на индукции. При генерации таблиц для  $n$  процессов использовалась программа генерации таблиц для числа процессов на единицу меньше. Плюсы этого способа заключаются в том, что он легко переносится на большее количество процессов и создаёт все возможные варианты обучающих выборок. Также было выявлено, что самой существенной проблемой при генерации таблиц является обращение к памяти, так как таблицы занимают достаточно большой её объём. Поэтому было решено модифицировать алгоритм так, чтобы текущая область генерируемой таблицы целиком помещалась в кэш процессора.

### Литература

1. <https://www.criu.org>

УДК 004.896

## Алгоритм навигации мобильного робота на основе рекуррентных нейронных сетей

*Евсеев Д.А.*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной статье рассматривается алгоритм навигации мобильного робота в среде на основе рекуррентных нейронных сетей.

Агент движется в среде, которая представляет собой квадратный лабиринт с препятствиями. Задача робота состоит в том, чтобы научиться планировать маршрут из любого начального состояния в среде в любое конечное. Сначала робот движется в среде случайным образом, собирая данные о среде, на которых затем обучается нейронная сеть, используемая для планирования маршрута.

Эксперименты проводятся в симуляторе V-REP с использованием робота E-PUCK. Сенсорика робота: 8 ультразвуковых сенсоров и камера, которая получает изображение RGB 128×128 пикселей.

Вектор состояния робота в среде  $V$  состоит из следующих компонент:  $V_1 - V_{30}$  — компоненты, полученные после сжатия изображения с помощью сверточного автоэнкодера [1],  $V_{31} - V_{38}$  — компоненты, которые соответствуют данным с дальномеров

робота. Робот может выполнять в среде следующие три действия: движение прямо ( $a_{\text{forw}}$ ) на расстояние  $d$  и повороты налево ( $a_{\text{left}}$ ) и направо ( $a_{\text{right}}$ ) на угол  $\alpha$ .

Основная идея, лежащая в основе данного алгоритма, — это предсказание следующего состояния робота в среде по текущему состоянию и действию робота. Среди различных архитектур нейронных сетей многослойная LSTM [2] наиболее подходит для решения данной задачи. Если агент знает, в какое состояние он попадает из текущего при совершении определенного действия для всех состояний среды, он сможет спланировать маршрут.

Обучение сети происходит следующим образом. Робот движется в среде случайным образом, собирая 8000 наборов  $(S, S', a)$ , где  $S$  — вектор текущего состояния робота в среде,  $S'$  — вектор следующего состояния,  $a$  — действие робота в состоянии  $S$ . Далее этот dataset используется для обучения трех сетей:  $LSTM_{\text{forw}}$ ,  $LSTM_{\text{left}}$  и  $LSTM_{\text{right}}$ , соответствующих действиям робота. На вход каждой из сетей подаются вектора  $S$ , на выход — вектора  $S'$ , соответствующие определенному действию. Таким образом, каждая из сетей обучается предсказывать следующее состояние по текущему в случае совершения роботом определенного действия. Также этот dataset используется для обучения трех сетей  $LSTM_{\text{forw\_inv}}$ ,  $LSTM_{\text{left\_inv}}$  и  $LSTM_{\text{right\_inv}}$ . На вход каждой из сетей подаются вектора  $S'$ , на выход — вектора  $S$ , соответствующие определенному действию.  $LSTM_{\text{forw\_inv}}$ ,  $LSTM_{\text{left\_inv}}$  и  $LSTM_{\text{right\_inv}}$  обучаются выдавать предыдущее состояние по текущему для действий  $a_{\text{forw}}$ ,  $a_{\text{left}}$ ,  $a_{\text{right}}$ .

Алгоритм планирования маршрута.

$V_{\text{next}} = \text{compute\_next}(V_{\text{cur1}}, a)$ ,  $V_{\text{prev}} = \text{compute\_prev}(V_{\text{cur2}}, a)$  — функции, которые вычисляют следующее и предыдущее состояние по текущему и действию с помощью LSTM.

$V_{\text{init}}$  — стартовая точка,  $V_{\text{targ}}$  — целевая точка, до которой нужно построить маршрут.

$V_{\text{inter}}$  — точка пересечения цепочек следующих и предыдущих состояний.

$\text{compute\_path}(V_{\text{init}}, V_{\text{inter}})$  — процедура построения маршрута (списка векторов, кодирующих действия) от начальной точки до точки пересечения.

$\text{remember\_prev}(V_{\text{next}})$  — процедура записи в память при вычислении следующего состояния, из какого состояния агент попал в это состояние и какое действие при этом совершил.

$\text{retrieve\_prev}(V_{\text{cur}})$  — процедура, которая из памяти, созданной процедурой  $\text{remember\_prev}(V_{\text{next}})$ , получает для данного состояния  $V_{\text{cur}}$  состояние, из которого агент попал в состояние  $V_{\text{cur}}$  и какое действие при этом совершил.

Procedure  $\text{find\_intersection}(V_{\text{init}}, V_{\text{targ}})$

$V_{\text{cur1}} = V_{\text{init}}, V_{\text{cur2}} = V_{\text{targ}}$

$n = 0$

if  $V_{\text{cur1}} = V_{\text{init}}$

then return  $V_{\text{cur1}}$

else

do

for each  $a_1$  in  $(a_{\text{forw}}, a_{\text{left}}, a_{\text{right}})$

for each  $a_2$  in  $(a_{\text{forw}}, a_{\text{left}}, a_{\text{right}})$

do

$V_{\text{next}} = \text{compute\_next}(V_{\text{cur1}}, a_1)$

$\text{remember\_prev}(V_{\text{next}})$

$V_{\text{prev}} = \text{compute\_prev}(V_{\text{cur2}}, a_2)$

$n \leftarrow n + 1$

```

        find_intersection( $V_{next}$ ,  $V_{prev}$ )
    end if
end procedure
Procedure compute_path( $V_{init}$ ,  $V_{inter}$ )
     $V_{cur} = V_{inter}$ 
     $i = 0$ 
    while  $i \neq n$ 
        a,  $V_{prev} = \text{retrieve\_prev}(V_{cur})$ 
        actions[n-1-i] = a
         $V_{cur} \leftarrow V_{prev}$ 
    end procedure

```

Вычислительные эксперименты. Было выбрано произвольным образом пять пар начальное состояние—конечное состояние, при этом сравнивалось время навигации робота под управлением данного алгоритма и время навигации робота, двигающегося случайным образом. Горизонтальная штриховка — время навигации алгоритма, вертикальная — время движения до цели случайным образом, усредненное за шесть попыток (рис. 1).

Из графика видно, что робот под управлением данного алгоритма навигации доезжает до цели значительно быстрее, чем робот, двигающийся случайным образом.

Разработанный алгоритм позволяет роботу планировать маршрут от произвольного начального состояния до произвольного конечного в среде после предварительного обучения, используя данные, полученные с сенсоров робота.

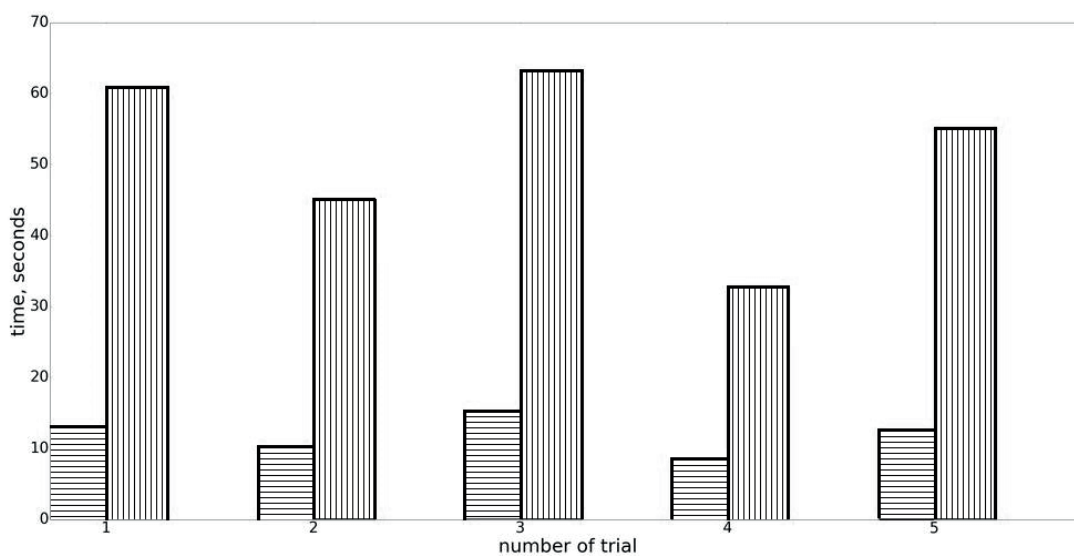


Рис. 1. Время навигации робота до цели

### Литература

1. *Makhzani A., Frey B.J.* Winner-take-all autoencoders // In Advances in Neural Information Processing Systems. 2015. P. 2773–2781.
2. *Hochreiter S., Schmidhuber J.* Long short-term memory // Neural Computation. 1997. V. 9, N 8. P. 1735–1780.

УДК 51-71

**Линеаризованные решения волнового уравнения на простейших графах***А.И. Аллилуева, А.И. Шафаревич*Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Институт проблем механики РАН

Описана асимптотика задачи Коши для волнового уравнения с переменной скоростью и локализованными начальными условиями на прямой, полупрямой и бесконечном звездном графе. Решение состоит из коротковолновой и длинноволновой частей; коротковолновая часть движется вдоль характеристик, в то время как длинноволновая удовлетворяет задаче Гурса или Дарбу. В случае звездного графа обсуждается распределение энергии по ребрам; это распределение зависит от расположения собственных подпространств унитарной матрицы, которая задает краевое условие в вершине звезды.

УДК 517.955.8

**Квазимоды для псевдодифференциальных уравнений с нетривиальным субглавным символом и приложение к уравнению массового графена***А.Ю. Аникин<sup>1,2</sup>, С.Ю. Доброхотов<sup>1</sup>*<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>Институт проблем механики РАН

Рассматривается двумерный оператор Дирака с радиально симметричным потенциалом, постоянным магнитным полем и переменной массой [1]. Изучаются асимптотические решения спектральной задачи для такого оператора (или квазимоды). Классическая гамильтонова система, связанная с такой задачей, является вполне интегрируемой и для построения квазимод можно использовать лиувиллевы торы этой системы. Переменная масса, не являющаяся радиально симметричной, играет роль (неинтегрируемого) возмущения. Для построения асимптотик можно использовать подход В.Ф. Лазуткина [2]: включить возмущение в гамильтонову систему, и строить квазимоды, отвечающие КАМ-торам [3]. Мы предлагаем другой подход, следуя [4], согласно которому квантуются торы интегрируемой системы, а возмущение дает вклад в уравнение переноса. Мы показываем, что такой метод более эффективен с точки зрения практических вычислений квазимод.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 17-51-150006.

**Литература**

1. *Katsnelson M.I.* Graphene: Carbon in Two Dimensions. Cambridge University Press, 2012.
2. *Lazutkin V.F.* KAM theory and semiclassical approximations to eigenfunctions. Springer Verlag, 1993.
3. *Арнольд В.И.* Малые знаменатели и проблемы устойчивости движения в классической и небесной механике // УМН. 1963. Т.18:6(114). С. 91.
4. *Dobrokhotov S., Rouleux M.* The semi-classical Maupertuis-Jacobi correspondence for quasi-periodic Hamiltonian flows with applications to linear water waves theory // Asymp. Anal. 2011. V. 74, N. 1–2. P. 33.

УДК 517.9

## Интегрируемые в эллиптических функциях уравнения для фронтов линейных волн на воде, порожденных локализованным источником

Ю.В. Брежнев<sup>1</sup>, С.Ю. Доброхотов<sup>2,3</sup>, А.В. Цветкова<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Институт проблем механики РАН

В настоящей работе рассматривается задача об описании фронтов волн на мелкой воде, порожденных локализованным источником. Уравнения мелкой воды используются для описания длинных волн и мезомасштабных вихрей в океане и атмосфере (см., например, [1]). Вопрос о нахождении фронтов возникает, в частности, при изучении задачи об описании асимптотики решений уравнений мелкой воды, порождаемых локализованным источником. Среди работ на эту тему можно отметить работы С.Ю. Доброхотова, В.Е. Назайкинского, Б. Тироцци, А.И. Шафаревича и других (см., например, [2], [3]). В рамках решения этой задачи интерес также представляет вопрос о наличии фокальных точек и точек самопересечения на фронтах.

Фронты, описывающие волны на мелкой воде, порожденные локализованным источником, в каждый момент времени  $t$  определяются концами траекторий, являющихся решением следующей задачи Коши  $p|_{t=0} = (\cos \psi, \sin \psi)^T$ ,  $\psi \in [0, 2\pi]$ ,  $x|_{t=0} = x^0 \in \square^2$  для системы Гамильтона с гамильтонианом  $H = |p| C(x)$ ,  $C(x) = \sqrt{gD(x)}$ . Здесь гладкая функция  $D(x)$  характеризует глубину водяного слоя,  $g$  — ускорение свободного падения, а  $x^0$  — вектор, характеризующий положение источника. В настоящей работе рассматривается случай, когда дно имеет вид  $D(x_1, x_2) = \frac{b+r^2}{a+r^2}$ . В зависимости от выбора параметров данная функция задает либо подводную банку, либо остров.

В работе найдены точные аналитические решения рассматриваемой системы Гамильтона. Также, используя полученные формулы, в программе Wolfram Mathematica можно построить кривые фронтов. В работе приведено несколько примеров иллюстрации фронтов в зависимости от формы дна. Для нетривиальной формы дна при  $t=0$  фронт состоит из единственной точки  $x^0$ , при малых  $t$  представляет собой замкнутую кривую, близкую к окружности, а затем на нем появляются фокальные точки и точки самопересечения. Для фокальных точек на фронте, т.е. точек, в которых вектор  $X_\psi = 0$ , тоже найдены выражения.

В работе также рассматривается модифицированная задача с гамильтонианом

$\tilde{H}(x, y; u, v) = \sqrt{u^2 + v^2} \sqrt{\frac{x^2 + b}{x^2 + a}}$ . В этом случае тоже получены точные аналитические решения.

### Литература

1. LeBlond P.H., Mysak L.A. Waves in the Ocean. Amsterdam: Elsevier, 1978.
2. Dobrokhotov S.Yu., Shafarevich A.I., Tirozzi B. Localized wave and vortical solutions to linear hyperbolic systems and their application to linear shallow water equations // Rus. J. Math. Phys. 2008. V. 15, No. 2. P. 192–221.
3. Доброхотов С.Ю., Назайкинский В.Е., Тироцци Б. Асимптотические решения двумерного модельного волнового уравнения с вырождающейся скоростью и локализованными начальными данными // Алгебра и анализ. 2010. Т. 20, вып. 6. С. 67–90.



УДК 517.9

## Асимптотика решения уравнения Гельмгольца в трехмерном слое переменной толщины с локализованной правой частью

*П.Н. Петров<sup>1</sup>, С.Ю. Доброхотов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт проблем механики РАН

В работе рассматривается задача о распространении звука от источника в мелководном волноводе с морским дном. Акустическое давление описывается уравнением Гельмгольца [1]:

$$\begin{cases} (h^2\Delta + n^2(x, y, z))u = F\left(\frac{x - \xi_1}{\mu}, \frac{y - \xi_2}{\mu}\right)g\left(\frac{z - z_0}{\mu}\right), \\ u|_{z=hd_1(x,y)} = 0, \\ u|_{z=hd_2(x,y)} = 0. \end{cases}$$

Здесь коэффициент  $n^2(x, y, z)$ , задающие границу слоя функции  $d_1(x, y) < d_2(x, y)$  и задающие источник функции  $F(x, y), g(z)$  предполагаются гладкими функциями всех своих аргументов. Кроме того, предполагается, что  $F(x, y), g(z)$  быстро убывают на бесконечности. Например, в качестве  $F(x, y), g(z)$  можно выбрать гауссовы экспоненты. Положительные параметры  $h$  и  $\mu$  предполагаются малыми. Числа  $(\xi_1, \xi_2, z_0)$  определяют координаты точки, в окрестности которой локализован источник.

С помощью операторного метода [2] и недавно развитого подхода [3] в предположении отсутствия «ловушечных» состояний и выполнения условий излучения на бесконечности (типа условия Зоммерфельда) в работе строится асимптотическое решение сформулированной задачи при  $1 \gg \mu \geq h$ . Асимптотика решения представляется в виде разложения на конечное число мод, каждая мода связана с парой лагранжевых многообразий. Одно из соответствующих многообразий определяет локализованную («сингулярную») в окрестности вертикального отрезка  $(x = \xi_1, y = \xi_2)$  часть решения, а второе — «размазанную» по всему слою осциллирующую («волновую») часть решения (с учетом возможного появления каустик и фокальных точек). В пределе  $F(x, y), g(z) \rightarrow \delta(x)\delta(y)\delta(z)$  полученные формулы описывают асимптотику функции Грина для рассматриваемого уравнения Гельмгольца, однако в отличие от такой асимптотики полученная формула позволяет достаточно явно описать влияние формы источника на волновую часть решения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-CNRS 17-51-150006.

### Литература

1. Кацнельсон Б.Г., Петников В.Г. Акустика мелкого моря. М.: Наука, 1997.
2. Маслов В.П. Операторные методы // М.: Наука, 1973. 544 с.
3. Anikin A.Yu., Dobrokhotoy, S.Yu., Nazaikinskii V.E. [et al.]. Dokl. Math. Maik Nauka/Interperiodica, 2017. N 96: 406.

---

---

## Секция НБИК–технологий

---

---

УДК 621.382+537.312.7+004.27

### **Миниатюризация органических мемристивных элементов на основе полианилина с использованием оптической литографии**

*Д.А. Лапкин<sup>1,2</sup>, А.В. Емельянов<sup>1,2</sup>, А.А. Ступников<sup>1</sup>, В.А. Демин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр Курчатовский Институт

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Мемристивные элементы являются перспективными кандидатами для физической реализации нейроморфных сетей [1]. Для этого такие элементы должны иметь определенный набор характеристик, таких как длительная стабильность резистивного состояния, высокое отношение проводимостей в высоко- и низкопроводящем состояниях, большое количество обратимых резистивных переключений и т. д. Исследованные в данной работе мемристивные элементы на основе органических соединений — проводящих полимеров — обладают рядом преимуществ перед неорганическими материалами, например, дешевизной и простотой изготовления, большим спектром техник формирования и т. д.

Основной составной частью традиционного органического мемристивного элемента является проводящий канал из полианилина толщиной около 150 нм и длиной около 1–2 мм. В данной работе длина канала была уменьшена до микронных размеров с помощью оптической литографии, что позволило уменьшить его толщину без потери проводимости. Были изготовлены образцы с толщиной канала 15, 27,5 и 75 нм и исследовано её влияние на характеристики мемристивного элемента. Все изготовленные образцы демонстрируют резистивное переключение с отношением проводимостей в высоко- и низкопроводящем состояниях от 50 до 100. Было показано, что уменьшение толщины канала со 150 до 15 нм приводит к уменьшению характерных времен резистивного переключения на два порядка, что позволило измерить стабильность элемента при циклическом переключении. Такой мемристивный элемент демонстрирует стабильное переключение в течении более чем  $10^4$  циклов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 16-13-00052 на оборудовании ресурсных центров Курчатовского комплекса НБИКС-технологий.

### **Литература**

1. Демин В.А., Емельянов А.В., Лапкин Д.А., Ерохин В.В., Кашкаров П.К., Ковальчук М.В. Нейроморфные элементы и системы как основа для физической реализации технологий искусственного интеллекта // Кристаллография. 2016. Т. 61, № 6. С. 958–968.

УДК 51-76

### **Аспекты резистентности молекулы ДНК**

*М.А. Галченкова<sup>1,2</sup>, П.М. Готовцев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе рассмотрены экспериментальные работы и существующие теории о механизмах миграции носителя заряда вдоль цепочки ДНК, произведен анализ параметров, от которых зависит проводимость биологической макромолекулы, предложена



идея создания единой базы экспериментальных данных, чтобы в дальнейшем разработать собственную модель, удовлетворяющую экспериментальным измеренным значениям. Данная модель, как предполагается, будет базироваться на уже имеющихся теориях о классических и квантовых механизмах переноса заряда [2]:

$$H = H_F + \frac{1}{2} \sum_n \alpha'_n \left( \frac{p_n^2}{m_n} + K_n z_n^2 \right) + \sum_n \frac{e^2 u_n^2}{6(4\pi\epsilon_0)^2 k_B T (z_n^2 + u_n^2)^2} + \sum_n e E z \delta(z - z_n) + U_M,$$

$$\text{где } H_F = H_{cl} + \langle \Psi | H_q | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \alpha'_n \left( \frac{p_n^2}{m_n} + K_n u_n^2 \right) + \langle \Psi | H_q | \Psi \rangle \quad [2],$$

$$H_q = \sum_{n=1}^N \alpha_n |n\rangle \langle n| + \sum_{n \neq k} v_{nk} |n\rangle \langle k| + \sum_{n=1}^N \alpha'_n u_n |n\rangle \langle n|,$$

$$U_M(z_n) = D_n (1 - e^{-\alpha_n z_n})^2 \quad (\text{потенциал Морзе}),$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n b_n(\tilde{t}) |n\rangle.$$

$b_n(\tilde{t})$  – вероятность обнаружения заряда на  $n$ -м сайте,  $m_n$  – масса  $n$ -го сайта,  $K_n$  – константа упругости,  $\alpha_n$  – энергия заряда на  $n$ -м сайте,  $\alpha'_n$  – константа связи заряда со смещением

$n$ -го участка от положения равновесия. В данной модели учтены не только старые подходы взаимодействия классических и квантовых систем, но и добавлены слагаемые, отвечающие за флуктуации осцилляторов в поперечном направлении  $z_n$ , влияние на систему внешнего приложенного электрического поля, нелинейные взаимодействия сайтов и заряд-дипольное взаимодействие. В дальнейшем данная система будет исследована и сопоставлена с экспериментальными данными.

Представленный материал не претендует на полноту освещения всех имеющихся исследований, которые ведутся в данном направлении на сегодня, но отражает основные направления и ряд наиболее значимых работ в этой области.

### Литература

1. Давыдов А.С. Биология и квантовая механика. Киев, 1979.
2. Фиалко Н.С. Моделирование переноса заряда в ДНК. Пущино, 2007.

УДК 576.08, 677.017.87, 677.494.7, 678

### Разработка и исследование нетканых волокнистых биосовместимых материалов на основе поликапролактона

*Р.В. Шариков<sup>1,2</sup>, Т.Х. Тенчурин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе исследованы материалы на основе ПКЛ (поликапролактона), полученные методом электроформования. В настоящее время нетканые материалы набирают популярность в области имплантологии для эндопротезирования [1]. Процесс электроформования позволяет получить волокнистые материалы на основе полимеров с заданными структурными и биомеханическими параметрами, что дает возможность приблизиться к нативным тканям [2].

В процессе электроформования важную роль играют параметры получения нетканых материалов, варьирование которых позволяет получить образцы с различными структурными и механическими характеристиками такими как диаметр волокон, пористость, размер пор, толщина материала и механическая прочность. Параметры формования (табл. 1), установленные в ходе процесса получения образцов на основе ПКЛ, позволили произвести материал с бездефектными волокнами (рис. 1).

Поликапролактон биоразлагаемый и биосовместимый полимер, разрешенный к использованию FDA для биомедицинского применения. Срок резорбции данного полиэфира в живом организме варьируется от нескольких месяцев до нескольких лет [3–5]. Материалы на основе ПКЛ также используют в тканевой инженерии в качестве каркасов (носителей) для клеток.

Целью настоящего исследования являлось сравнение эффективности трех методов заселения клетками нетканых носителей на основе поликапролактона, обладающих различными пространственными характеристиками.

Изучен процесс электроформования из растворов ПКЛ в хлороформе и этилацетате. Получены экспериментальные образцы нетканых волокнистых материалов толщиной от 160 до 770 мкм, со средним диаметром волокна от 3 до 20 мкм, максимальным размером пор от 24 до 80 мкм и прочностью от 6 до 11 МПа. Проведены исследования возможности заселения клетками изготовленных каркасов статичным (рис. 2), динамическим и капиллярным способом. Определены оптимальные структурные характеристики каркасов для каждого из методов клеточного заселения. Проведенные исследования показали возможность использования полученных материалов для пластики дефектов брюшной полости.

### Параметры получения нетканых материалов

Таблица 1.

Образец №	Концентрация полимера (ПКЛ), %	Растворитель	Напряжение, приложенное к капилляру, кВ	Расстояние от капилляра до осадительного электрода, см	Объемный расход полимерного раствора, мл/ч
1	8,6	90% ЭА + 10% ЭС	13	28	1
2	8,6	90% ХФ + 10% ЭС	14	29	5
3	15	90% ХФ + 10% ЭС	16	39	70

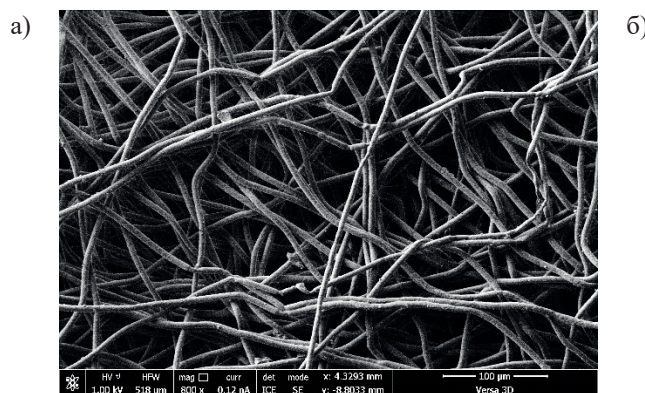
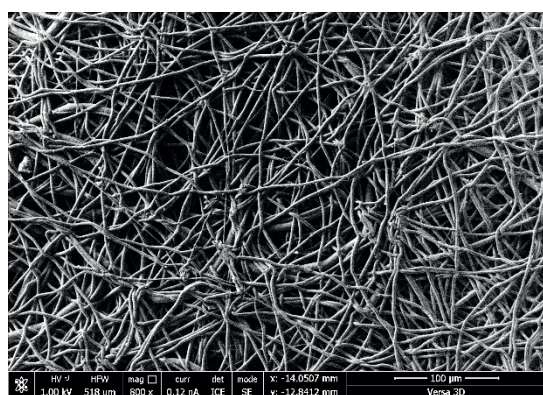


Рис. 1. Сканирующие электронные микрофотографии образцов на основе ПКЛ, полученных методом электроформования, при одинаковом увеличении:

- а) образец № 1 со средним диаметром волокон 3 мкм;
- б) образец № 2 со средним диаметром волокон 6 мкм

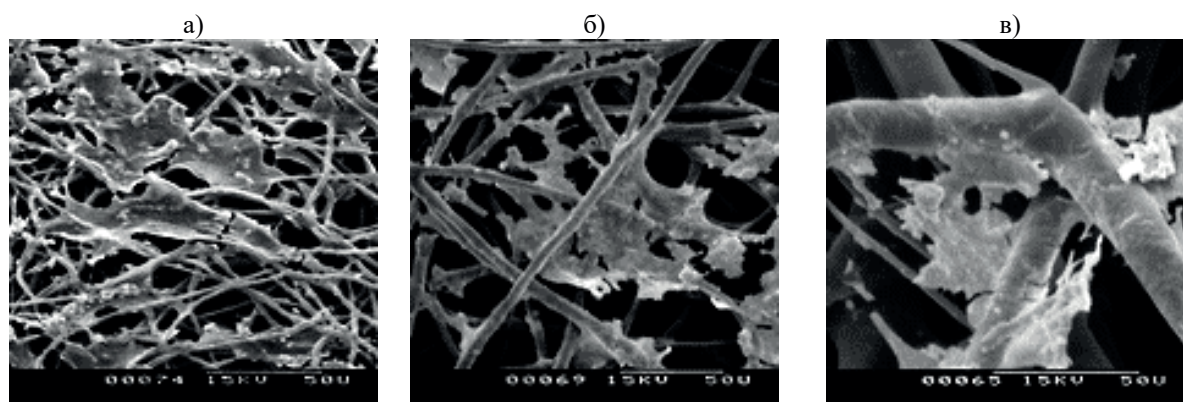


Рис. 2. Микроструктура образцов на основе ПКЛ после заселения клетками статичным методом заселения: а) образец № 1; б) образец № 2; в) образец № 3

### Литература

1. *Basile F., Biondi A., Donati M.* Surgical approach to abdominal wall defects: history and new trends // *Int. J. Surg.* 2013. N 11. Suppl. 1. P. 20–23.
2. *Rim N.G., Shin C.S., Shin H.* Current approaches to electrospun nanofibers for tissue engineering // *Biomed. Mater.* 2013. 8(1): 014102.
3. *Brugmans M.M., Soekhradj-Soechit R.S., van Geemen D. [et al.].* Superior tissue evolution in slow-degrading scaffolds for valvular tissue engineering // *Tissue Eng. Part A.* 2016. N 22(1–2). P. 123–132.
4. *Ebersole G.C., Buettmann E.G., MacEwan M.R. [et al.].* Development of novel electrospun absorbable polycaprolactone (PCL) scaffolds for hernia repair applications // *Surg. Endosc.* 2012. N 26(10). P. 2717–2728.
5. *Woodruff M.A., Hutmacher D.W.* The return of a forgotten polymer — polycaprolactone in the 21st century // *Prog. Polym. Sci.* 2010. N 35. P. 1217–1256.

УДК 612.825.8

### Исследование вариабельности нейронной активности в ретроспленальной коре головного мозга крыс в процессе приобретения нового поведения

*О.Е. Сварник<sup>1</sup>, И.А. Нажесткин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Вопросы, связанные с кодированием навыков в головном мозге, интересуют учёных достаточно давно. С появлением методов, позволяющих регистрировать нейронную активность у животных, находящихся в свободном поведении, исследования в этой области значительно шагнули вперёд.

При проведении экспериментов на данную тематику особое внимание достаточно давно уделяется ретроспленальной коре (РСК). Исследования показывают, что она, являясь интегратором сенсорной информации, имеющим связи с гиппокампом и парагиппокаммальным комплексом [1], играет очень важную роль в образовании и запоминании ассоциаций между сенсорными стимулами, присутствующими во время обучения [2]. Эксперименты показывают, что во время обучения в РСК формируются нейронные связи, ответственные за долгосрочное сохранение ассоциаций между сенсорными раздражителями [3], [4].

На данный момент очень мало известно о закономерностях формирования и обработки информации в этой области. В данной работе была предпринята попытка более

глубокого исследования закономерностей нейронной активности в РСК на различных этапах обучения крыс инструментальному поведению.

В эксперименте использовались две самки линии Long-Evans возрастом 6–9 месяцев. Перед началом обучения им была произведена имплантация микроэлектродов (NeuroNexus, США) в ретроспленальную кору. Затем, после реабилитационного периода (1 недели) было начато обучение. В специальной клетке инструментального поведения (MedAssociatesInc., США), оборудованной двумя педалями и кормушкой на противоположной стенке, проводилось поэтапное обучение нажатию на одну из педалей с целью получения пищевой награды. С момента начала обучения животные находились на пищевой депривации. Вода находилась в свободном доступе. Во время каждого сеанса обучения (30 минут) производилась непрерывная видеорегистрация поведения животного и запись сигналов нейронной активности с имплантированных микроэлектродов.

В процессе обработки видеозаписи в поведенческом континууме были выделены характерные поведенческие акты: пребывание у кормушки, подход к педали, пребывание у педали, подход к кормушке и т.д. Из записанных и оцифрованных сигналов нейронной активности были выделены времена потенциалов действия отдельных нейронов. Далее были отобраны нейроны, специфичные относительно поведенческих актов (критерием специфичности было превышение его активности в акте более чем на 50% относительно средней частоты данного нейрона на всем протяжении периода его регистрации). Поведенческие акты были разделены на успешные (завершившиеся вознаграждением в кормушке) и неуспешные (в результате которых вознаграждение дано не было).

Затем был произведён анализ варибельности активности нейронов на основе специального алгоритма [5]. Каждому поведенческому акту соответствовала точка в трёхмерном пространстве, в котором по осям были отложены средние частоты активности нейрона за период  $\pm 1$  с вокруг каждого из трёх событий акта: начало отхода от педали, начало и завершение нахождения у кормушки соответственно. Мерой варибельности было среднее евклидово расстояние между всеми точками попарно. Для проведения данного анализа была написана специальная программа на языке Visual Basic for Applications для Microsoft Excel.

Было выявлено, что у специфических нейронов варибельность их активности достоверно больше во время выполнения успешных (вознаграждаемых) актов, чем во время выполнения неуспешных (критерий Вилкоксона,  $z = 2,02$ ,  $p = 0,04$ , (рис. 1а)). У неспецифических нейронов (в том числе у совпадающих по средней частоте со специфическими нейронами) такой закономерности обнаружено не было (критерий Вилкоксона,  $z = 1,37$ ,  $p = 0,17$  (рис. 1б)).

Исходя из полученных данных можно видеть, что варибельность активности специфических нейронов достоверно выше, чем у неспецифических. Можно сделать предположение, что именно увеличение варибельности активности нейронов является признаком их вовлечения в специфическую деятельность при обучении.

Таким образом, в ретроспленальной коре были обнаружены нейроны, варибельность активности которых изменяется в зависимости от получения результата животным в обучении. Дальнейшее их исследование позволит вплотную подобраться к нейронной структуре формирования и запоминания нового навыка.



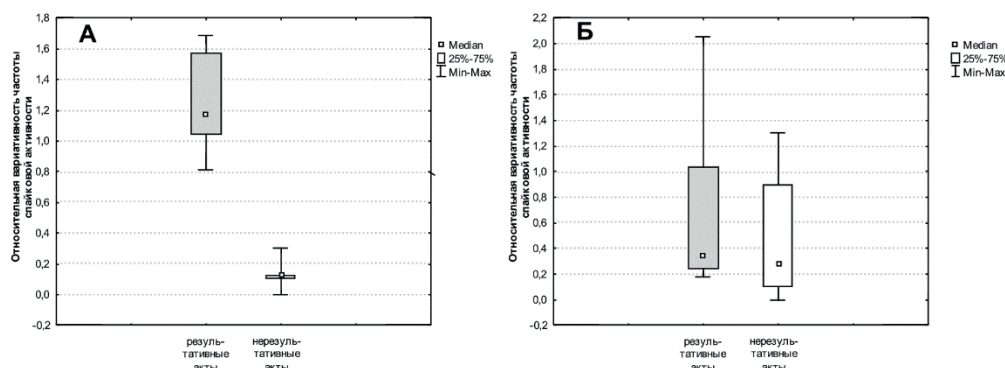


Рис. 1. Вариабельность частоты активности специфических (а) и неспецифических (б) нейронов в результативных и нерезультативных поведенческих актах

### Литература

1. Sugar J., Witter M.P., van Strien N.M., Cappaert N.L.M. The retrosplenial cortex: intrinsic connectivity and connections with the (para)hippocampal region in the rat. An interactive connectome // *Frontiers in Neuroinformatics*. 2011. V. 5. Article 7.
2. Kubik S., Miyashita T., Kubik-Zahorodna A, Guzowski J. F. Loss of activity-dependent Arc gene expression in the retrosplenial cortex after hippocampal inactivation: interaction in a higher-order memory circuit // *Neurobiology of Learning and Memory*. 2012. V. 97, N. 1. P. 124–131.
3. Katche C., Dorman G., Slipczuk L., Cammarota M., Medina J.H. Functional integrity of the retrosplenial cortex is essential for rapid consolidation and recall of fear memory // *Learning & Memory*. 2013. V. 20, N. 4. P. 170–173.
4. Gusev P. A., Gubin A. N. Arc/arg3.1 mRNA global expression patterns elicited by memory recall in cerebral cortex differ for remote versus recent spatial memories // *Frontiers in Integrative Neuroscience*. 2010. V. 4. Article 15.
5. Karlsson M. P., Tervo D. G. R., Karpova A. Y. Network Resets in Medial Prefrontal Cortex Mark the Onset of Behavioral Uncertainty // *Science*. 2012. V. 338. P. 135.

УДК 539.199

### Исследование равномерности механических свойств волокнистых нетканых материалов

*К.Г. Антипова, Т.Е. Григорьев, К.И. Луканина, С.В. Крашенинников,  
В.Г. Мамагулашвили, А.Д. Шепелев*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Для создания искусственного клеточного каркаса в регенеративной медицине используется множество материалов с различными физико-механическими и морфологическими свойствами. Волокнистые нетканые материалы из биосовместимых полимеров часто применяются для решения подобных задач. Важной характеристикой этих материалов является однородность механических свойств полотна материала. В данной работе было проведено исследование механической однородности нетканого материала из поли-L-лактида (4032D), полученного методом электроспиннинга.

Первоначально был изготовлен материал, технологические параметры которого указаны в табл. 1.

Материал был разрезан вдоль на восемь равных полосок размером  $3 \times 0,5 \pm 0,1$  см. Для всех образцов были проведены механические испытания — одноосное растяжение со скоростью 25 мм/мин и длиной рабочей зоны 1 см на универсальной разрывной машине Instron 5965. Графическое изображение результатов представлено на рис. 1 и рис. 2. На рис. 3 приведена микрофотография нетканого материала.

В результате было выявлено, что в области середины полотна нетканого материала наблюдается уменьшение значений модуля Юнга и прочности на 30% и 20% от среднего соответственно.

Таким образом, видно, что полотно волокнистого нетканого материала характеризуется неравномерностью механических свойств в разных областях.

### Технологические параметры материала из поли-L-лактида

Таблица 1.

Параметр	Значение
Концентрация раствора	9%
Растворитель	90% хлороформ + 10% этиловый спирт
Объемный расход	$5,0 \pm 0,3 \text{ см}^3/\text{ч}$
Расстояние между электродами	$25 \pm 1 \text{ см}$
Осадительный электрод	барабан диаметром 12,5 см, скорость вращения — 40 об/мин, рабочая область — 5 см
Средний диаметр волокон	4,8–5,9 мкм
Плотность упаковки	$9,6 \pm 0,6\%$
Толщина слоя	$0,38 \pm 0,07 \text{ мм}$

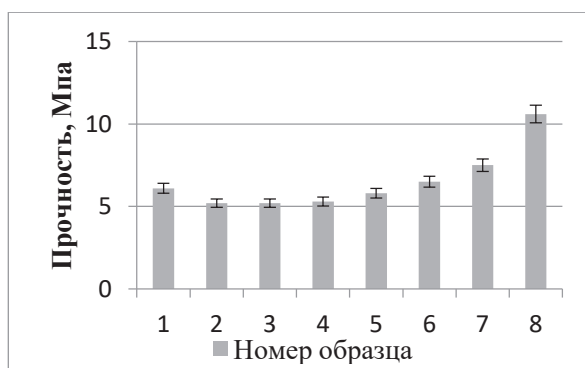


Рис. 1. Прочность материала

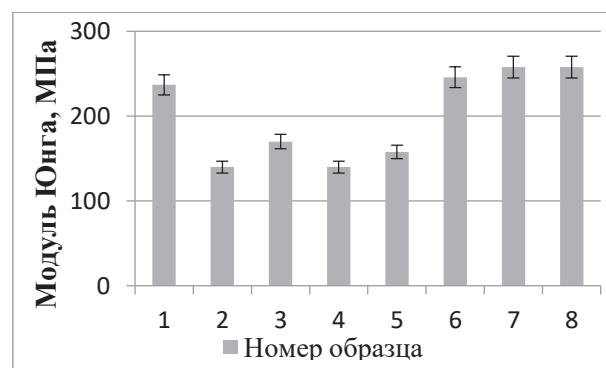


Рис. 2. Модуль Юнга материала

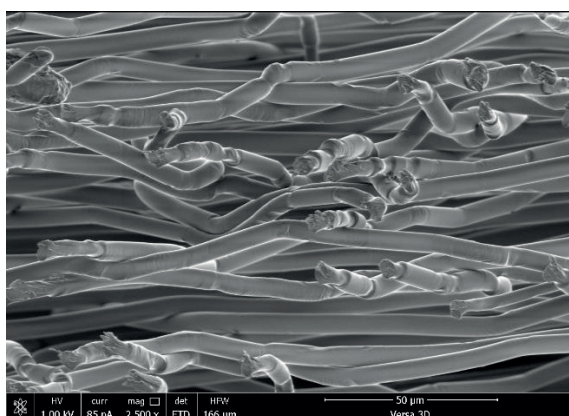


Рис. 3. Микрофотография нетканого материала из поли-L-лактида

**Рассеяние света и фотолюминесценция в кремниевых наночастицах,  
формируемых методами электрохимического травления и лазерной абляции  
в жидкости**

*А.В. Колчин, Ф.В. Кашаев, А.В. Скобелкина*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Возможности модификации структурных и оптических свойств кремния путем микро- и наноструктурирования открывают широкие перспективы для его применения не только в оптоэлектронике [1], но и в биомедицинских приложениях для диагностики и лечения различных заболеваний [2]. Данное применение обусловлено такими свойствами, как биodeградируемость, биосовместимость и низкий уровень токсичности наночастиц данного полупроводника. Значительные успехи в этой области были достигнуты при использовании метода электрохимического травления, в результате которого возможно формирование пористого кремния (ПК). Такие структуры состоят из воздушных пор и кремниевых нанокристаллов. Непосредственное получение кремниевых наночастиц (КНЧ) для использования в биомедицинских приложениях происходит путем механического измельчения образцов ПК. Они могут применяться в качестве фотолюминесцентных (ФЛ) маркеров [3] и контрастирующих агентов для оптической когерентной томографии [4], поскольку обладают эффективными ФЛ и рассеянием света в диапазоне 700–1100 нм, который является диагностическим окном прозрачности биотканей. Также КНЧ могут быть сформированы методом импульсной лазерной абляции в различных жидкостях. Его основными преимуществами является химическая чистота конечного продукта и возможность формирования КНЧ размером меньше 50 нм. В связи с вышеизложенным представляется интересным изготовление КНЧ методами электрохимического травления и лазерной абляции и исследование их структурных и оптических свойств.

В данной работе образцы ПК микропористого типа (размер пор до 2 нм) были сформированы путем электрохимического травления пластин кремния *p*-типа с удельным сопротивлением 2–5 Ом·см в растворе  $\text{HF} : \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = 1 : 2$  в течение 30 минут при плотности тока 60 мА/см<sup>2</sup>. Затем образцы облучались пикосекундным импульсным Nd : YAG лазером (1064 нм, 30 пс, 10 Гц, 30 мДж) в буферной жидкости  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ . Структурные свойства аблированного ПК были исследованы с помощью атомной силовой микроскопии (АСМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). В свою очередь, спектры ФЛ были получены при возбуждении второй гармоникой пикосекундного импульсного Nd : YAG лазера (532 нм).

Гистограмма распределения КНЧ по размерам, построенная путем анализа изображений АСМ (рис. 1а), демонстрирует наличие фракции с относительно малыми размерами от 2 до 20 нм, что упрощает их введение в живые организмы и способствует более быстрой биodeградации по сравнению с частицами больших размеров. Спектры КРС при длине волны возбуждения 632 нм (рис. 1б) свидетельствуют о наличии кристаллической ( $520 \text{ см}^{-1}$ ) и аморфной ( $480\text{--}510 \text{ см}^{-1}$ ) фаз в полученных ансамблях КНЧ.

Помимо структурных свойств КНЧ были исследованы процессы ФЛ в образцах, формируемых методом лазерной абляции ПК в этаноле. Рисунок 2 свидетельствует о наличии эффективной ФЛ в диагностическом окне прозрачности биотканей. Данная особенность может быть обусловлена проявлением как квантово-размерного эффекта, так и наличием дефектных состояний.

Таким образом, в настоящей работе показано, что последовательным применением методов электрохимического травления и лазерной абляции становится возможным формирование КНЧ, обладающими структурными и оптическими свойствами, позволяющими применять их в биомедицинских приложениях.

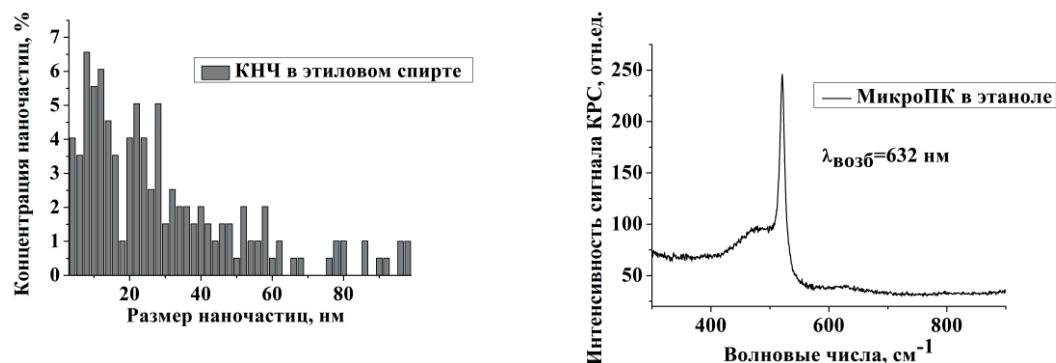


Рис. 1. а) Гистограмма распределения по размерам КНЧ полученных абляцией ПК в этаноле и б) их спектр КРС

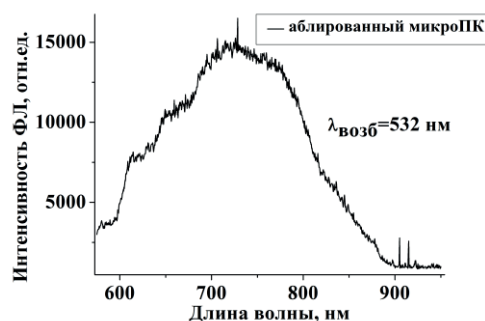


Рис. 2. Спектры ФЛ аблированного в этаноле ПК

### Литература

1. Амасев Д.В. [и др.]. Анизотропия оптических, электрических и фотоэлектрических свойств модифицированных фемтосекундным лазерным облучением пленок аморфного гидрогенизированного кремния // ЖТФ. 2017. Т. 87, № 6. С. 909–913.
2. Ксенофонтова О.И. [и др.]. Пористый кремний и его применение в биологии и медицине // ЖТФ. 2014. Т. 84, № 1. С. 67–78.
3. Ji-Ho Park [et al.]. Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications // N. Mat. 2009. V. 8. P. 331–336.
4. Заботнов С.В. [и др.]. Кремниевые наночастицы как контрастирующие агенты в методах оптической биомедицинской диагностики // Квант. Эл. Т. 47, № 7. С. 638–646.

УДК 544.182.32

### Исследование электронных и электрических свойств полярной молекулы $C_{60}F_{18}$ для описания её адсорбции на Au(111)

Л.П. Суханов<sup>1,2</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>, А.В. Горячевский<sup>1,2</sup>, В.Г. Станкевич<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для адекватного описания адсорбции и самоорганизации полярных молекул  $C_{60}F_{18}$  на поверхности Au(111) выполнены квантово-химические исследования электронных и электрических свойств отдельной молекулы: её электрического дипольного момента, распределений электростатического потенциала, напряжённостей электрического поля и электронной плотности. С помощью различных методик теории функционала плотности впервые рассчитаны эти свойства с контролируемой точностью. Получена достоверная величина электрического дипольного момента молекулы  $C_{60}F_{18}$  в диапазоне от 10 до 11 Д. Показано, что известное приближение точечного диполя для напряжённости



электрического поля выполняется с точностью 30% уже на расстояниях, вдвое больших размера молекулы. Проведено сравнение рассчитанных по теории функционала плотности низших вакантных и высших занятых молекулярных орбиталей с их образами, ранее полученными с помощью сканирующей туннельной спектроскопии.

Фторид фуллерена  $C_{60}F_{18}$  занимает особое место среди прочих фтор-фуллеренов  $C_{60}F_n$ . Во-первых, он не имеет изомеров, что облегчает исследование его электронной структуры. Во-вторых, благодаря расположению 18 атомов фтора лишь на одной стороне сферического каркаса  $C_{60}$  (рис. 1а), молекула обладает большим электрическим дипольным моментом (ЭДМ)  $\sim 10$  Д [1], [2], направленным по её оси симметрии третьего порядка (рис. 1).

Наличие у молекулы  $C_{60}F_{18}$  высокого ЭДМ создаёт предпосылки для приготовления из этих молекул упорядоченных структур нанометрового масштаба, перспективных для применения в молекулярной электронике. В проведённых нами экспериментах наблюдалось упорядочение молекул  $C_{60}F_{18}$  на поверхностях разной химической активности: не только с химической  $C_{60}F_{18}/Ni(100)$  [3–5], но и с физической  $C_{60}F_{18}/Au(111)$  [6] формами адсорбции. Методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) при комнатной температуре были обнаружены [6] плотноупакованные островки из молекул  $C_{60}F_{18}$  на поверхности  $Au(111)$  с упорядоченной доменной структурой внутри них и преимущественно ортогональной ориентацией ЭДМ молекулы относительно подложки. Для адекватного описания адсорбции и самоорганизации полярных молекул  $C_{60}F_{18}$  на поверхности  $Au(111)$  необходимо знать электронные и электрические свойства отдельной молекулы. С другой стороны, выявленная в [6] при температуре жидкого гелия физическая адсорбция отдельной молекулы  $C_{60}F_{18}$  на поверхности  $Au(111)$  предполагает малое возмущающее воздействие поверхности на саму молекулу. Тем самым, возникает уникальная возможность для проверки пригодности различных схем теории функционала плотности (ТФП) к описанию электронного строения молекулы  $C_{60}F_{18}$ .

В настоящей работе выполнены квантово-химические исследования электронных и электрических свойств молекулы  $C_{60}F_{18}$ : её ЭДМ, распределений электростатического потенциала (ЭП) и напряжённостей электрического поля в широкой области пространства. В рамках различных методик ТФП впервые рассчитан упомянутый перечень свойств с контролируемой точностью. Проведено сравнение рассчитанных по ТФП низших вакантных молекулярных орбиталей (НВМО) и высших занятых молекулярных орбиталей (ВЗМО) с их образами, полученными с помощью сканирующей туннельной спектроскопии (СТС).

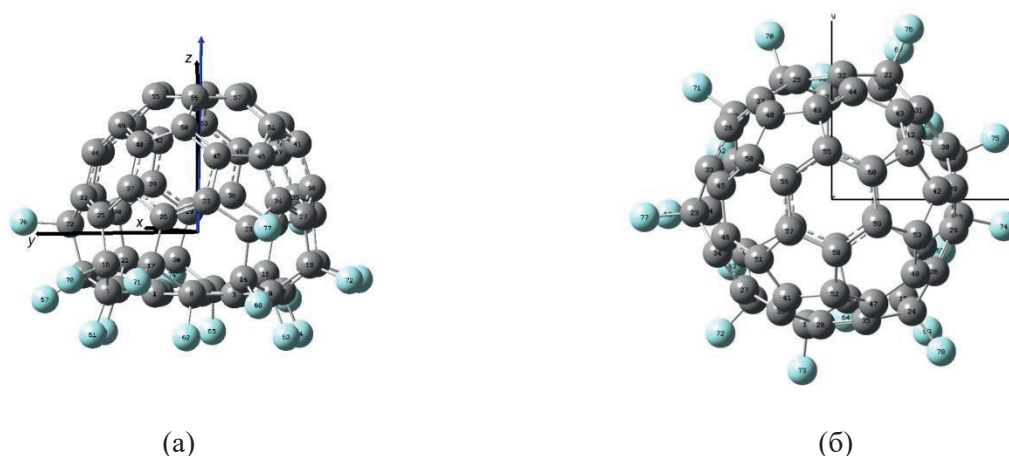


Рис. 1. Пространственная структура молекулы  $C_{60}F_{18}$ : вид сбоку (а) и вид сверху (б). Атомы С – тёмные шары, атомы F – светлые шары. Ось  $z$  показывает направление ЭДМ (синий вектор) вдоль оси симметрии  $C_{3v}$

## Литература

1. Neretin I.S., Lyssenko K.A., Antipin M.Yu. [et al.]. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2000. V. 39(18). P. 3273.
2. Neretin I.S., Lyssenko K.A., Antipin M.Yu. [et al.]. // *Russ. Chem. Bull.* 2002. V. 51(5). P. 754.
3. Лебедев А.М., Суханов Л.П., Бржезинская М.М. [и др.]. // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* 2012. № 10. С. 53.
4. Лебедев А.М., Меньшиков К.А., Свечников Н.Ю. [и др.]. // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2013. Т. 77, № 9. С. 1290.
5. Лебедев А.М., Суханов Л.П., Бржезинская М.М. [и др.]. // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* 2017. № 8. С. 30.
6. Bairagi K., Bellec A., Chumakov R.G. [et al.]. // *Surf. Sci.* 2015. V. 641. P. 248.

УДК 57.084.1

### Изучение биокинетики наночастиц диоксида титана в организме лабораторных крыс

Е.С. Кормазева, А.А. Анциферова

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Наночастицы диоксида титана (НЧ TiO<sub>2</sub>) имеют ряд особых физико-химических свойств, благодаря которым они активно применяются при производстве различных бытовых продуктов и средств личной гигиены. Порошок НЧ TiO<sub>2</sub> обладает насыщенным белым цветом, из-за которого он используется при производстве лакокрасочных изделий; а благодаря способности НЧ TiO<sub>2</sub> поглощать ультрафиолетовое излучение, они входят в состав солнцезащитных средств [1]. Однако некоторые исследования продемонстрировали негативное воздействие НЧ TiO<sub>2</sub> на клеточные культуры: они проявили общее токсическое действие как под воздействием ультрафиолетового излучения, так и без него [2]. Таким образом, необходимо всестороннее изучение влияния НЧ TiO<sub>2</sub> как *in vitro*, так и на организм в целом. Одним из практических аспектов исследования является возможности детектирования НЧ TiO<sub>2</sub> в сложном матриксе, в частности, в биологической ткани.

В данном исследовании изучалось динамическое распространение НЧ TiO<sub>2</sub> в организме крыс-самцов линии Вистар после разового внутрижелудочного введения и их прохождение через гистогематические барьеры. Регистрация количественного содержания НЧ TiO<sub>2</sub> в составе биологической ткани осуществлялось методом радиоактивных индикаторов.

Порошок НЧ TiO<sub>2</sub> кристаллической модификацией брутита без функциональной оболочки был облучен на циклотроне для получения радиоактивной метки по реакции (1):



где <sup>48</sup>V выступал в качестве радиоактивной метки с T<sub>1/2</sub> = 16 дней и энергиями гамма-излучения E = 983,5 кэВ и E = 1,312 МэВ, по которой велись дальнейшие расчеты. Экспозиция была проведена при токе 2 мкА и энергии 32 МэВ в течение 2 ч.

Для введения животным был приготовлен коллоидный раствор НЧ TiO<sub>2</sub> с концентрацией 10 мг/мл. 1 мл препарата обладал активностью 29 кБк.

Суспензия вводилась 20 крысам внутрижелудочно в объеме 1 мл. Крысы были поделены на четыре группы по времени забора органов: 4 часа, 24 часа, 48 часов и 120 часов (5 суток) после введения раствора. Для изучения биокинетики НЧ TiO<sub>2</sub>, согласно литературным данным, были отобраны следующие ткани организма: кровь, желудок, тонкий кишечник, толстый кишечник, печень, почки, мозг, а также кал и моча. Количественное содержание НЧ TiO<sub>2</sub> определялось по радиоактивному изотопу <sup>48</sup>V в сравнении с контрольным образцом.

Наибольшие значения содержания НЧ TiO<sub>2</sub> за все время эксперимента наблюдались в желудочно-кишечном тракте, а также в печени. Проникновение НЧ TiO<sub>2</sub> в мозг не было

обнаружено. Данные обстоятельства объясняются тем фактом, что отсутствие функционального покрытия у НЧ вызывает их агрегацию до микронных размеров, что значительно сказывается на их способности проникновения внутрь клетки и через гистогематические барьеры.

Исследование продемонстрировало, что НЧ  $\text{TiO}_2$  не представляют значительной опасности для организма.

Кроме того, полученные значения использовались в математической модели биокинетики НЧ  $\text{TiO}_2$  для прогнозирования распределения НЧ в случае хронического перорального поступления в рамках РВРК-модели (Physiologically Based Pharmacokinetic Modeling). Данная модель позволила провести предварительные оценочные расчеты для дальнейших исследований воздействия НЧ  $\text{TiO}_2$  на организм в экспериментах *in vivo*.

### Литература

1. Анциферова А.А., Кашкаров П.К., Ковальчук М.В. Наночастицы в биосфере // Синтез, строение и свойства металл/полупроводниксодержащих наноструктурированных композитов М.: ТЕХНОСФЕРА. 2016. С. 605–611.
2. Zhukova L. V., Kiwib J., Nikandrov V.V.  $\text{TiO}_2$  nanoparticles suppress Escherichia coli cell division in the absence of UV irradiation in acidic conditions // Colloids and Surfaces. B: Biointerfaces. 2012. V. 97. P. 240–247.

УДК 612.82

### Создание 3D-атласа в MNI-координатах, основанного на функциональной парцелляции коры и внутренних структур головного мозга человека

З.А. Носовец<sup>1,2</sup>, В.А. Орлов<sup>2</sup>, В.Л. Ушаков<sup>2</sup>, А.А. Пойда<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Данная работа посвящена адаптации разработанного Глассером, ван Эссенем и др. атласа коры головного мозга [1] в стандартизированное пространство и добавлению в него внутренних структур. Преимущество атласа Глассера состоит в том, что он совмещает основные комплементарные свойства (архитектура, связность, функциональность, топография), на которых базируется создание атласов, а также использует весь неокортекс в обоих полушариях (выделено 180 зон в каждом). Основная задача работы состояла в переносе двумерного атласа в трёхмерное MNI (Montreal Neurological Institute) пространство и добавлении внутренних структур.

Один из недостатков атласа Глассера состоит в том, что в нём содержится поверхностная разбивка коры головного мозга, но не содержится внутренних структур. Размерность атласа двумерная, в то время как в стандартизованных системах координат (MNI [2–3], Talairach [4] и др.) атласы представлены в трёхмерном виде. Также он был представлен в форматах SIFTI и GIFTI, сильно отличающихся от NIFTI (стандартизованный формат данных) и неудобных для использования в большинстве программ по обработке данных, связанных с головным мозгом (например SPM).

Для того чтобы построить атлас в трёхмерном пространстве, были использованы файлы, содержащие разбивку зон, файлы поверхностей, а также анатомические изображения МРТ в MNI-координатах. В командной среде Connectome Workbench с помощью функций из программного пакета FreeSurfer был произведен пересчёт двухмерных координат в трёхмерные в MNI-пространстве.

При первичном переводе атласа в MNI-пространство было обнаружено несоответствие зон серого вещества с совмещённым анатомическим изображением. В связи с этим было решено использовать более сильное пространственное размытие, чтобы покрыть всё серое вещество. Для этого было создано несколько моделей атласа с различными параметрами функций (коэффициентами глубины построения), а также с использованием поверхностей с различной степенью размытости. Однако помимо серого



вещества атлас также затрагивал белое вещество и цереброспинальную жидкость. Для удаления лишних участков атласа, попавших не на серое вещество, были использованы стандартизированные маски белого вещества и цереброспинальной жидкости. Для интеграции в полученный атлас внутренних структур был использован стандартизированный атлас AAL (automatic anatomy labelling) [5]. Из атласа AAL были извлечены карты внутренних структур, которые после пространственного размывания были введены в ранее полученный атлас.

В результате был построен атлас коры и внутренних структур головного мозга человека, содержащий 401 зону: по 180 зон в каждом полушарии для серого вещества, по 20 зон в каждом полушарии для внутренних структур, и одна центральная зона. На рис. 1 изображено посрезовое представление данного атласа, наложенное на усреднённое анатомическое МРТ-изображение высокого разрешения. Из рисунка видно, что атлас идеально описывает все извилины и не касается других тканей (не соответствующих серому веществу). Атлас представлен в унифицированном формате NIFTI и полностью применим и интегрирован для использования в стандартных исследовательских программах обработки фМРТ данных, таких как SPM, FSL и др.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта ОФИМ № 17-29-02518.

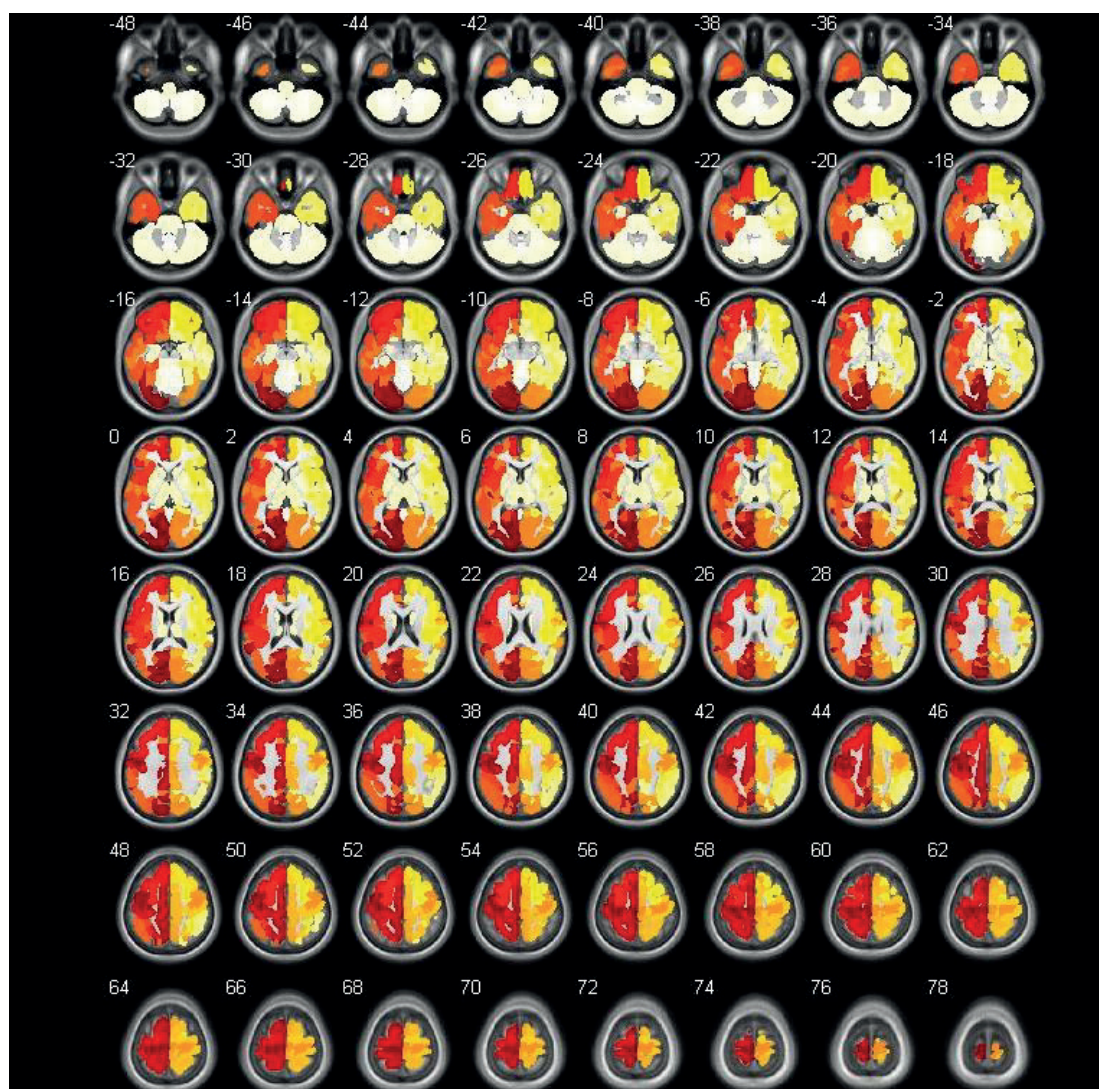


Рис.1. Посрезовое представление данного атласа, наложенное на усреднённое анатомическое МРТ-изображение высокого разрешения

## Литература

1. *Glasser M.F. [et al.]*. A multi-modal parcellation of human cerebral cortex // *Nature*. 2016. V. 536. P. 171–178.
2. *Evans A.C., Collins D.L., Milner B.* An MRI-based stereotactic atlas from 250 young normal subjects // *Soc. Neurosci. Abstr.* 1992. V. 18. P. 408–492.
3. *Evans A.C. [et al.]*. 3D statistical neuroanatomical models from 305 MRI volumes // *IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference*. 1993. P. 1813–1817.
4. *Talairach J., Tournoux P.* Co-planar Stereotaxic Atlas of the Human Brain: 3-Dimensional Proportional System - an Approach to Cerebral Imaging. NY: Thieme Medical Publishers, 1988. 112 p.
5. *Tzourio-Mazoyer N. [et al.]*. Automated Anatomical Labeling of activations in SPM using a Macroscopic Anatomical Parcellation of the MNI MRI single-subject brain // *NeuroImage*. 2002. V. 15. P. 273–289.

УДК 51-76

### О параметрах импульса тока для активации релаксационного порогового интегратора

*Т.С. Земскова*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В вычислительной нейронауке простейшей практически используемой моделью спайкового нейрона является релаксационный пороговый интегратор (Leaky Integrate-and-Fire neuron, англ.) [1], подпороговая динамика которого описывается линейным дифференциальным уравнением на трансмембранный потенциал нейрона. Эту модель впервые описал французский нейрофизиолог Луи Лапик в своей классической работе 1907 года [2].

При моделировании спайковых нейронных сетей, где каждый нейрон имеет множество входящих связей, критически важным является адекватный выбор значений амплитуды и длительности импульсов синаптического тока, обмениваясь которыми, нейроны взаимодействуют между собой как информационные системы. В частности, требуется знание реакции модельного нейрона на импульс входящего тока заданной формы.

В данной работе, во-первых, численно получена пограничная зависимость («реобазы») амплитуды  $I_a$  от длительности  $\tau_a$  импульса входящего тока в виде альфа-функции,  $I(t) = I_a \cdot (t/\tau_a) \cdot \exp(-t/\tau_a)$ , при котором достигается пороговое значение потенциала LIF-нейрона (рис. 1). Во-вторых, воспроизведена точная аналитическая зависимость  $I_a = I_c / (1 - \exp(-\tau_a/\tau_m))$ , где  $I_c$  и  $\tau_m$  являются параметрами модели LIF-нейрона для кривой реобазы в случае прямоугольного импульса тока [2]. Наконец, исследована зависимость момента генерации спайка от длительности импульса входящего тока, когда амплитуда импульса задается по кривой реобазы. Проведено сравнение полученных результатов со случаем идеального порогового интегратора (Perfect Integrate-and-Fire neuron, англ.), для которого кривая реобазы в случае прямоугольного импульса тока является гиперболой.

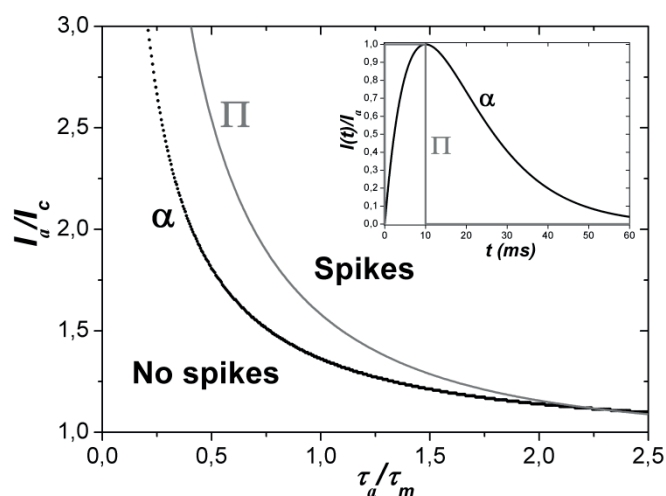


Рис. 1. Кривая реобазы LIF-нейрона для альфа-импульса тока (численный расчет, черные кружки) и прямоугольного импульса тока (аналитическая зависимость, сплошная серая линия) при  $I_c = 15$  пА и  $\tau_m = 20$  мс. Вставка: временные профили импульсов тока при  $I_a = 40$  пА и  $\tau_a = 10$  мс.

### Литература

1. Koch C. Biophysics of Computation: Information Processing in Single Neurons. Oxford University Press, 1999.
2. Lopicque L. Quantitative investigations of electrical nerve excitation treated as polarization // Biol. Cybern. 2007. V. 97. P. 341.

УДК 001.891.572

### Моделирование токов утечки в выполненном на основе мемритивного нанокompозита $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ кросс-баре типа 1Т1М

*И.А. Суражеский*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Смоделировано функционирование структуры типа кросс-бар архитектуры 1Т1М [1] порядка  $256 \times 256$  и  $512 \times 512$  элементов с использованием мемритивного [2] нанокompозита  $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ .

Основным ограничивающим критерием размера и качества работы кросс-баров является величина тока утечки, который, складываясь с током, протекающим через исследуемый мемристор, влияет на результирующее значение считанной проводимости (рис. 1). Для его подавления в исследуемых кросс-барах использовались транзисторы с длиной затвора  $L = 0.35$  мкм и шириной затвора  $W = 1$  мкм, описанные в формате международного стандарта BSIM-SOI [3]. Роль мемритивного нанокompозита в процессе исследования выполняла модель VTEAM [4].

Моделирование проводилось в режиме «worst case», т.е. целевой мемристор находился в высокоомном состоянии, в то время как все остальные мемристоры кросс-бара находились в низкоомном состоянии. Этот режим позволяет оценить максимальное влияние токов утечки. В моделировании использовались четыре различные по размеру мемритивные структуры. Результаты исследования представлены в табл. 1.

Анализ полученных величин тока показывает, что в кросс-баре порядка  $256 \times 256$  ток утечки не превышает 0.2% рабочего тока. Таким образом, для последующего моделирования структур порядка  $512 \times 512$  элементов подходят все из исследуемых нанокompозитов. Однако, с целью снижения энергопотребления и размеров конечного кросс-бара для моделирования  $512 \times 512$  элементов был выбран нанокompозит с величиной

$1 \times 1 \times 2$  мкм<sup>3</sup>. В данном случае величина тока утечки составила 0.11%, что делает данный кросс-бар полностью работоспособным.

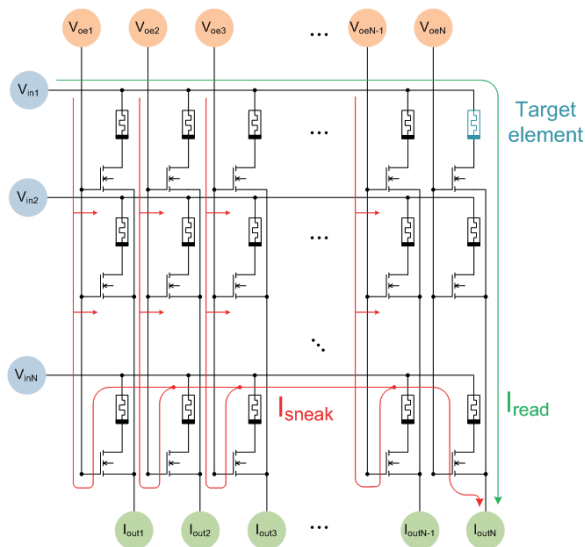


Рис.1. Токи утечки в кросс-баре  $N \times N$ , где  $V_{in}$  и  $I_{out}$  — одни из  $N$  входных и соответствующие им выходных линий кросс-бара,  $V_{oc}$  — управляющие входы кросс-бара

### Зависимость тока утечки от площади мемристивного нанокompозита

Таблица 1.

№	Размер, мкм <sup>3</sup>	N, порядок кросс-бара	$R_{off.,s}$ МоМ	$R_{on,s}$ МоМ	$I_{read\ 1 \times N}$ , нА	$I_{read\ 1 \times 1}$ , нА	$I_{read\ 1 \times N} - I_{read\ 1 \times 1}$ , нА
1.	$1 \times 1 \times 4$	$256 \times 256$	800	12.1	1.2516	1.2500	0.0016
2.	$1 \times 1 \times 2$	$256 \times 256$	400	6.05	2.5015	2.5000	0.0015
3.	$1 \times 1 \times 2$	$512 \times 512$	400	6.05	2.5027	2.5000	0.0027
3.	$1 \times 1 \times 1$	$256 \times 256$	200	3.025	5.0015	4.9999	0.0016
4.	$2 \times 2 \times 2$	$256 \times 256$	100	1.5125	10.0017	9.9998	0.0019

### Литература

1. *Yakovic C.* Analysis of a Memristor-based 1T1M Crossbar Architecture // The 2011 International Joint Conference on Neural Networks. 2011. P. 3243–3247.
2. *Chua L.* Memristor — the missing circuit element // IEEE Transactions on Circuit Theory. 1971. N 18. P. 507–519.
3. BSIMSOIv4.4 MOSFET MODEL Users' Manual // BSIM GROUP. 2010.
4. *Kvatinsky S.* VTEAM — A General Model for Voltage Controlled Memristors // IEEE Transactions On Circuits And Systems—II: Express Briefs. 2015. V. 62, N. 8.

УДК 57.023

## **Влияние мемантина на гиппокампальный нейрогенез у взрослых животных после облучения**

*Е.Я. Подоляк<sup>1</sup>, А.В. Кедров<sup>2</sup>, А.А. Лазуткин<sup>1,2</sup>, Г.Н. Ениколопов<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт нормальной физиологии им. П.К. Анохина

<sup>3</sup>Stony Brook University

Облучение животных, включая человека, терапевтическими дозами радиации нарушает процесс нейрогенеза во взрослом мозге. Наблюдаются изменения в пролиферации и дифференцировке нейральных стволовых клеток зубчатой извилины гиппокампа, приводящие к снижению когнитивных функций индивида [1], [2]. Таким образом, остро встает проблема компенсации нейрогенеза (увеличения продукции новых нейронов стволовыми клетками взрослого мозга). В ряде работ были описаны пронеурогенные эффекты мемантина — антагониста NMDA-рецепторов, широко используемого для восстановления когнитивных функций при деменциях [3], [4]. Настоящее исследование посвящено изучению влияния мемантина на гиппокампальный нейрогенез у взрослых мышей после облучения.

В ходе работы было показано, что и облучение, и воздействие мемантина способны снижать количество покоящихся нейральных стволовых клеток (QNP) на длительном промежутке времени (рис.1).

Кроме того, спустя месяц после облучения пролиферативная активность покоящихся нейральных стволовых клеток также снижена (рис. 2).

Столь длительный эффект облучения объясняется повышенной уязвимостью нейральных стволовых клеток к гамма-облучению по сравнению с другими популяциями в зубчатой извилине гиппокампа. Негативное влияние мемантина, по-видимому, вызвано свойством препарата усиливать нейрогенез, истощая пул покоящихся стволовых клеток. Данная популяция не является возобновляемой, поскольку после цикла делений покоящаяся стволовая клетка начинает экспрессировать астроцитарные маркеры, претерпевает ряд морфологических изменений и примерно через месяц становится зрелым астроцитом [5]. Таким образом, снижение количества покоящихся стволовых клеток в длительной перспективе может привести к существенному снижению количества новых нейронов в гиппокампе и, как следствие, ухудшению когнитивных функций.

Среди прочих анализируемых параметров для оценки предполагаемого краткосрочного положительного воздействия мемантина на нейрогенез был проведен подсчет новорожденных нейронов, предшественники которых находились на стадии клеточного деления через неделю после облучения.

По результатам работы сделан вывод о хроническом дефиците пролиферирующих стволовых и прогениторных клеток гиппокампа на протяжении месяца, вызванным гамма-облучением. Мемантин, с одной стороны, в краткосрочной перспективе увеличивает количество новых нейронов. Однако, в то же время мемантин усиливает эффект облучения, дополнительно истощая популяцию нейральных стволовых клеток, что может привести к нарушению когнитивных функций в долгосрочной перспективе.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 15-29-01305 и РФФИ № 16-15-00294.



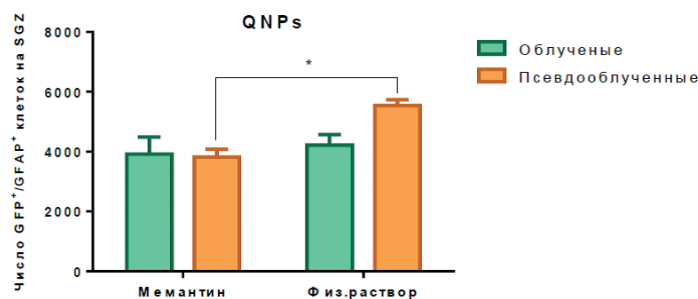


Рис. 1. Эффекты облучения и мемантина на количество покоящихся стволовых клеток в зубчатой извилине гиппокампа на 31-й день после облучения  
«\*» — достоверное отличие (тест Тьюки,  $p < 0,05$ )

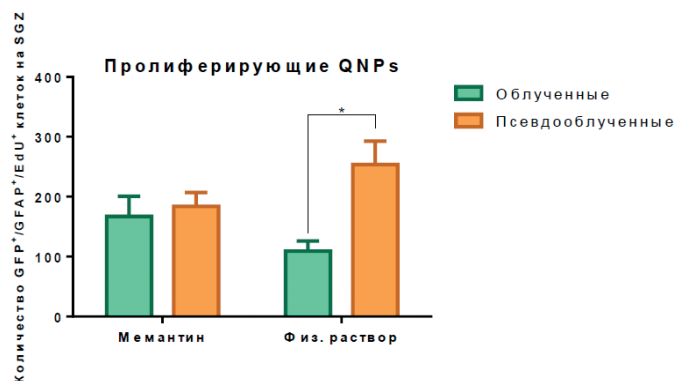


Рис. 2. Эффекты облучения и мемантина на количество пролиферирующих покоящихся нейральных предшественников (QNP) в зубчатой извилине гиппокампа на 31 - й день после облучения  
«\*» —достоверное отличие (тест Тьюки,  $p < 0,05$ )

### Литература

1. *Andres-Mach M., Rola R., Fike J.R.* Radiation effects on neural precursor cell in the dentate gyrus // *Cell Tissue*. 2008. Res 331. P. 251–262.
2. *Encinas J.M. [et al.]*. Quiescent adult neural stem cells are exceptionally sensitive to cosmic radiation // *Exp. Neurol*. 2008. N 210(1). P. 274–279.
3. *Johnson J.W., Kotermanski S.E.* Mechanism of action of memantine // *Current Opinion in Pharmacology*. 2006. N. 6. P. 61–67.
4. *Maekawa M. [et al.]*. NMDA receptor antagonist memantine promotes cell proliferation and production of mature granule neurons in the adult hippocampus // *Neuroscience Research*. 2008. N 63. P. 259–266.
5. *Encinas J.M. [et al.]*. Division-coupled astrocytic differentiation and age-related depletion of neural stem cells in the adult hippocampus // *Cell Stem Cell*. 2011. N 8. P. 566–579.

УДК 575.86

### Разработка молекулярных методов видовой идентификации осетровых с помощью SNP-генотипирования

*А.Ш. Ибрагимова, А.В. Недолужко, С.М. Расторгуев*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Осетры — одни из древнейших представителей ныне живущих позвоночных животных — символ и достояние России. На сегодняшний день, вследствие экологических

проблем, неосмотрительного вылова и браконьерства, эти древние рыбы оказались под угрозой полного исчезновения.

Русский осетр (*Acipenser gueldenstaedtii*) — один из ценнейших видов рыб бассейна Каспийского моря, генетически очень близкий с еще более редким видом – персидским осетром (*A. persicus*). До настоящего времени не существовало способа с уверенностью различать эти два родственных вида, поэтому ихтиологи не могли прийти к единому мнению относительно таксономического ранга персидского осетра [1].

Запутанная таксономия создает трудности для легальных производителей аквакультурной чёрной икры, поскольку по правилам международной организации СИТЕС (Convention on International Trade in Endangered Species of Wild Fauna and Flora – CITES) экспортная икра должна иметь сопроводительные документы с указанием вида осетровых, при этом видовая идентификация возможна только с использованием анализа ДНК. Более того, умение различать виды осетровых с использованием генетических методов помогло бы бороться с браконьерством, дав возможность отличать нелегальную икру от легальной, так как персидского осетра на российских рыбохозяйствах не культивируют, и если в партии рыбной продукции были найдены образцы персидского осетра, то, скорее всего, это браконьерская продукция.

Целью данной работы является разработка методики, которая помогла бы: регулировать вылов промысловых видов осетровых путем распределения квот вылова между различными рыболовными организациями стран бассейна Каспийского моря; подтвердить видовой статуса персидского осетра; помочь в борьбе с браконьерством.

В данной работе при помощи метода SNP-генотипирования исследовалось 538 образцов десяти популяций русского и персидского осетров по 10 локусам ядерного генома этих видов [2]. Было показано, что отобранные для проведения исследования молекулярные маркеры эффективно разделяют изучаемые популяции и, следовательно, результаты нашей работы могут быть успешно использованы в качестве панели маркеров для идентификации *A. gueldenstaedtii* и *A. persicus*. Применение данного метода превосходит по своей разрешающей способности методы, основанные на морфологических признаках и маркерах митохондриальной ДНК, применяемые ранее.

Кроме того, были получены молекулярно-генетические свидетельства того, что персидский осетр является отдельным видом.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

### Литература

1. Berg L.S. *Acipenser guldenstadti persicus*, a sturgeon from the south Caspian Sea // Ann. Mag. Hist. London Ser. 1934. V. 13, N 10. P. 317–318.
2. Rastorguev S.M. [et al.]. High-throughput SNP-genotyping analysis of the relationships among Ponto-Caspian sturgeon species // Ecology and evolution. 2013. V. 8, N 3. P. 2612–2618.

УДК 538.95

### Изучение мемристивных свойств нанокompозита $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$

К.Э. Никируй<sup>1,2</sup>, А.В. Емельянов<sup>1,2</sup>, В.А. Демин<sup>1,2</sup>, В.В. Рыльков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)

Мемристивные структуры на основе оксидов являются перспективными кандидатами для использования в энергонезависимой памяти и в нейроморфных системах (НС) в роли аналогов синапсов [1].

Исследуемые мемристоры представляют собой трехслойные структуры металл–нанокompозит(НК)–металл, в роли НК выступает  $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ . Структуры изготовлены методом ионно-лучевого распыления составной мишени. В одном цикле

формируются НК с различным содержанием  $\text{CoFeV}$ . Диапазон значений  $x = 5\text{--}50$  ат.%. При  $x$  порядка 10 ат.% наблюдается эффект резистивного переключения (РП).

В работе изучены ключевые электрофизические свойства мемристоров данного типа, такие как ВАХ, устойчивость к переключениям, время сохранения состояния. ВАХ мемристоров представлена на рис. 1. Эффект РП можно объяснить образованием проводящих филаментов из вакансий кислорода вблизи наночастиц  $\text{CoFeV}$ . При приложении положительного напряжения на управляющий электрод происходит замыкание верхнего и нижнего электродов филаментами из кислородных вакансий и сопротивление всей структуры определяется наименьшим возможным сопротивлением  $R_{\text{on}}$  (участки 2, 3 на рис. 1). Кислородные вакансии выступают в роли легирующей примеси  $n$ -типа. При приложении противоположного напряжения проводящие филаменты разрушаются, сопротивление структуры определяется наибольшим возможным сопротивлением  $R_{\text{off}}$  (участки 1, 4 на рис. 1).

Устойчивость мемристора к переключениям определяется количеством циклов переключений из низкопроводящего состояния в высокопроводящее и обратно. Переключения осуществляются импульсами длительностью 150 мс и амплитудой 5 В, после переключения измеряется значение сопротивления структуры на напряжении 0.1 В.

Для определения времени сохранения состояния измеряется сопротивление мемристора через равные промежутки времени (10 с) при напряжении 0.1 В после переключения в высоко-, низкопроводящее и промежуточные состояния с помощью алгоритма переключения мемристоров в заданное состояние. Алгоритм переключения мемристора в состояние с заданным сопротивлением основан на подаче импульсов напряжения с плавно растущей амплитудой. Знак амплитуды импульса определяется знаком разности между текущим сопротивлением и заданным.

Также в работе была изучена пластичность мемристоров на основе НК  $(\text{CoFeV})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ , включая пластичность, зависящую от времени прихода импульса (spike-timing-dependent plasticity — STDP). На мемристор подавался импульс, представляющий собой аналог разности потенциалов действий (ПД) на пре- и постсинаптической мембранах при задержке по времени  $dt$ . С помощью изменения значения  $dt$  была получена зависимость относительного изменения проводимости мемристора при измерении до и после каждого импульса. Перед подачей импульса мемристор переводился в заданное начальное состояние с помощью описанного выше алгоритма. Полученная зависимость качественно совпадает с пластичностью биологического синапса, что подтверждает возможность применения исследуемых мемристоров в качестве аналогов синапсов при аппаратной реализации НС.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (RFMEFI58717X0042) на оборудовании ресурсного центра электрофизических методов (НИЦ «Курчатовский институт»).

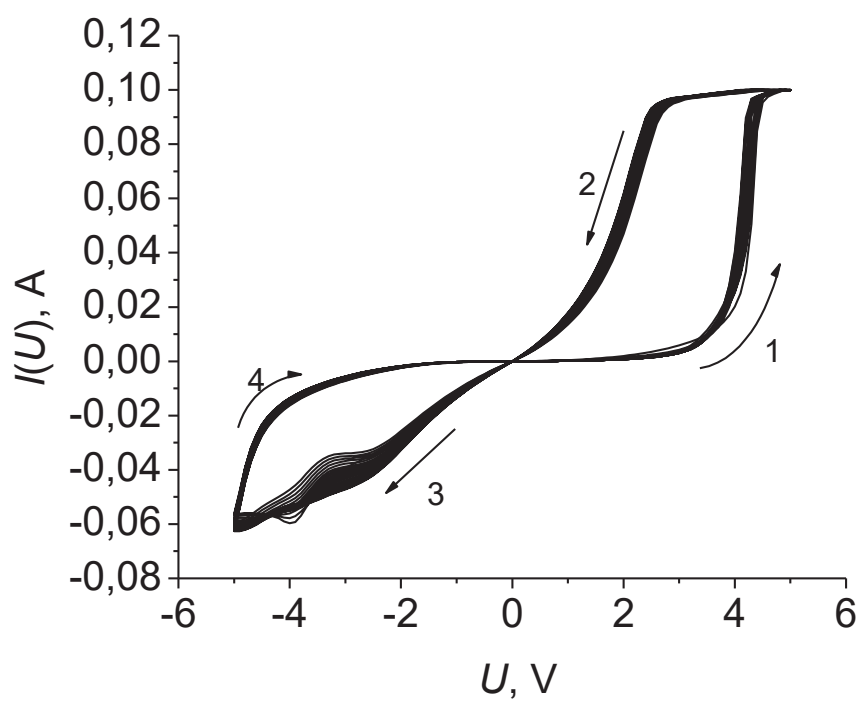


Рис. 1

### Литература

1. Demin V.A., Emelyanov A.V., Lapkin D.A. [et al.]. // Crystallography Reports. 2016. V. 61(6). P. 992–1001.

УДК 538.915

**Эффект Джозефсона в гибридных структурах сверхпроводник-топологический изолятор-сверхпроводник на основе наноразмерных монокристаллов  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ .***Д.С. Яковлев<sup>1,2,3</sup>, Д.С. Львов<sup>1</sup>, О.В. Скрыбина<sup>1</sup>, В.С. Столяров<sup>1,2</sup>.*<sup>1</sup>Институт физики твердого тела РАН<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>3</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В начале XX века было предсказано, что электронные возбуждения в конденсированных системах могут вести себя как майорановские фермионы [1]. Одной из таких систем являются кристаллы трехмерных топологических изоляторов (ТИ). Примерами таких материалов являются широко известные соединения  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$  и др. Отличительной особенностью данного типа ТИ является присутствие внутри запрещенной зоны электронов «объема», квазичастичных состояний, описываемых линейным законом дисперсии Дирака (конус Дирака). Эти состояния локализованы на поверхности кристалла, где проявляют целый ряд необычных свойств, которые могут лечь в основу будущей, устойчивой к внешним воздействиям (за счет топологической защищенности), электроники и спинтроники. Так, в недавних работах [2], [3] было показано существование моды майорановских фермионов на интерфейсе между сверхпроводником и сверхпроводящими за счет наведенной в них сверхпроводимости топологически защищенными состояниями InAs нанопроволоки.

В данном докладе мы сообщаем о синтезе и исследовании сверхтонких  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$  нанокристаллитов с толщиной до нескольких десятков нанометров (10–30 нм) и поперечным размером до 2 мкм, выращенных с помощью PVD-метода синтеза (физическое осаждение из газовой фазы).

При помощи электронной литографии и магнетронного напыления к этим нанокристаллитам были подведены сверхпроводящие контакты из ниобия. Электронно-транспортные измерения продемонстрировали сильную джозефсоновскую связь. Критический ток таких структур, измеренный при температуре 0,3 К достигал  $I_c=1,4 \mu\text{A}$ .

Таким образом, была продемонстрирована возможность реализации гибридных низкоразмерных систем сверхпроводник–ТИ для дальнейшего исследования экзотических квантовых эффектов, возникающих на их интерфейсах.

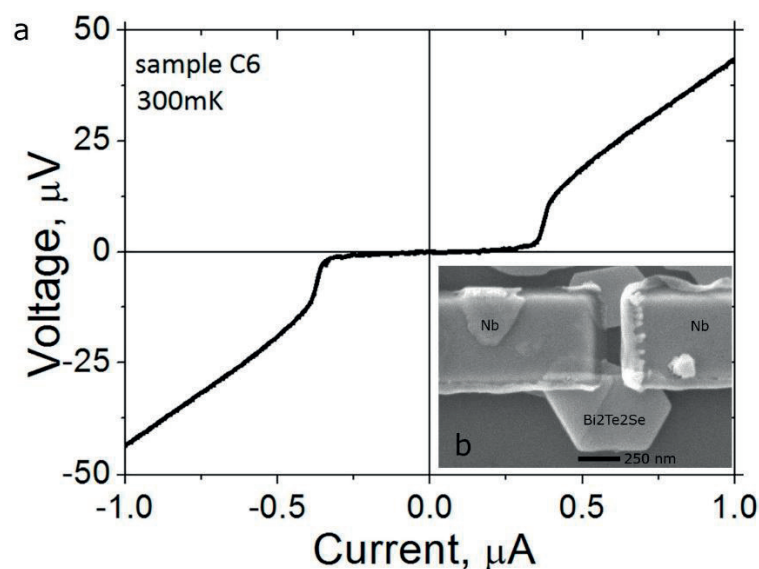


Рис. 1. Типичная вольт-амперная характеристика измеренная при 0,3 К; SEM изображение одного из исследованных образцов

### Литература

1. Wilczek F. Majorana returns // Nature Physics. 2009. V. 5, N 9. P. 614–618.
2. Tiira J. [et al.]. Magnetically-driven colossal supercurrent enhancement in InAs nanowire Josephson junctions // Nature Communications. 2017. V. 8.
3. Das A. [et al.]. Zero-bias peaks and splitting in an Al-InAs nanowire topological superconductor as a signature of Majorana fermions // Nature Physics. 2012. V. 8, N 12. P. 887.

УДК 621.315.592

### Фотоэлектрические и оптические свойства металлоорганических перовскитов на основе галогенидов свинца

Д.В. Амасев<sup>1</sup>, С.В. Попов<sup>2</sup>, А.Г. Казанский<sup>2</sup>, С.А. Козюхин<sup>3</sup>, В.Г. Михалевич<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

В последние годы внимание исследователей, работающих в области фотовольтаики, привлекают материалы на основе метиламмониевых галоидных перовскитов. Эти материалы обладают превосходными фотоэлектрическими свойствами, которые привели к созданию солнечных элементов на их основе. Эффективность преобразования энергии таких солнечных элементов за последние несколько лет достигла значений, превышающих 20% [1]. Однако, существенной проблемой использования данных материалов является нестабильность их параметров при внешних воздействиях. Понимание физических процессов, происходящих в перовскитах при внешних воздействиях, может способствовать решению этой проблемы.

Металлоорганический перовскит на основе иодида свинца  $CH_3NH_3PbI_3$  является наиболее исследуемым материалом среди металлоорганических соединений. Такое внимание к нему связано с его оптимальной для фотоэлектрических материалов шириной запрещенной зоны  $E_g = 1.55$  эВ и высокой фоточувствительностью. В то же время, несмотря на эти преимущества, фотоэлектрические и оптические свойства этого материала в значительной степени подвержены внешним воздействиям (длительному освещению,

влиянию атмосферы и влаги). Поэтому наблюдается рост интереса к перовскитам, демонстрирующим большую стабильность параметров, в частности, к более широкозонным металлоорганическим гибридным перовскитам, содержащих в качестве галогена

$Br$  ( $E_g = 2.3 \text{ эВ}$ ) [2] и соединений  $Br$  с  $I$ .

В работе представлены результаты исследований фотоэлектрических и оптических параметров метиламина бромид свинца  $CH_3NH_3PbBr_3$  и влияния на эти параметры окружающей среды. Проведено сравнение данных параметров перовскитов на основе бромида свинца и йодида свинца.

В качестве образцов исследовались тонкие плёнки (толщиной 0.7–1 мкм) перовскитов. Плёнки перовскитов формировались на кварцевых подложках одноступенчатым методом с использованием состоящей в равных долях смеси растворов  $CH_3NH_3I$  и  $PbI_2$  или  $CH_3NH_3Br$  и  $PbBr_2$  в диметилформамиде и последующим вакуумным отжигом. Полученные плёнки перовскитов имели микрокристаллическую структуру. Все измерения проводились при планарной конфигурации алюминиевых контактов в воздушной среде и в вакууме ( $10^{-4}$  Па) при комнатной температуре.

На рис. 1 приведены нормированные спектры фотопроводимости для двух разных типов образцов. Как видно из рисунка, фотопроводимость перовскита на основе йодида свинца больше, чем фотопроводимость на основе бромида свинца. Однако оба образца имеют высокую фотопроводимость (отношение величин между максимальным и минимальным значением фотопроводимости составляет более трех порядков). Также можно отметить разный наклон зависимостей в области края поглощения (диапазоны энергий квантов света 1.2–1.5 эВ и 1.1–1.8 эВ для перовскитов на основе йодида и бромида свинца соответственно). Меньшая крутизна, наблюдаемая в спектрах фотопроводимости для перовскитов на основе бромида свинца, может указывать на большую разупорядоченность в структуре данного материала.

Было обнаружено, что измерения в атмосфере воздуха приводят к увеличению фотопроводимости. На рис. 2 представлены спектры фотопроводимости перовскита на основе бромида свинца, измеренные в вакууме и в воздушной среде. Как видно из рисунка, при измерении в воздушной среде наблюдается увеличение фотопроводимости при энергиях кванта больших 1.8 эВ. Мы полагаем, что это связано с осаждением кислорода на оборванные связи или его диффузией в дефекты типа вакансий. Это может приводить к уменьшению концентрации рекомбинационных центров в запрещенной зоне полупроводника и, как следствие, к увеличению фотопроводимости.

Также было исследовано влияние длительного освещения на фотоэлектрические параметры металлоорганических перовскитов на основе бромида свинца и проведено сравнение с результатами, полученными для перовскитов на основе йодида свинца. В частности, были получены спектральные зависимости фотопроводимости  $\Delta\sigma_{ph}$  перовскита на основе бромида свинца  $CH_3NH_3PbBr_3$  при комнатной температуре до и после длительного освещения. Анализ экспериментальных данных показал, что длительное освещение белым светом интенсивностью  $40 \text{ мВт/см}^2$  не изменяет форму спектра в области энергий квантов, соответствующих оптическим переходам с участием внутризонных состояний. В то же время, в случае перовскитов на основе йодида свинца  $CH_3NH_3PbI_3$  аналогичные эксперименты показали, что длительное освещение приводит к фотоиндуцированному увеличению плотности электронных состояний внутри запрещенной зоны. Полученные результаты указывают на большую стабильность фотоэлектрических параметров  $CH_3NH_3PbBr_3$  при длительных световых воздействиях по сравнению с параметрами  $CH_3NH_3PbI_3$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-29-06423).



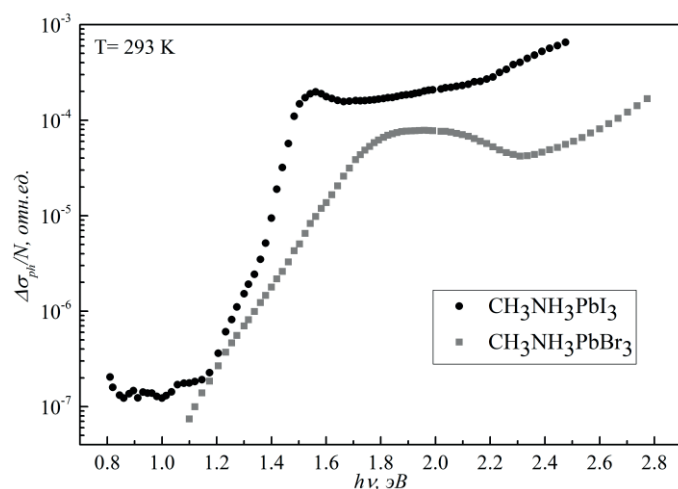


Рис. 1. Нормированные на число квантов  $N$  спектры фотопроводимости перовскитов на основе йодида свинца (черные точки) и на основе бромид свинца (серые квадраты)

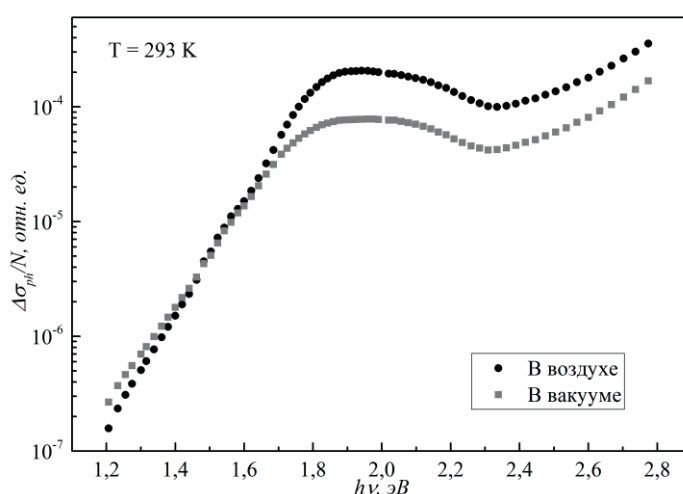


Рис. 2. Спектры фотопроводимости  $\Delta\sigma_{ph}$  перовскитов на основе бромид свинца в воздушной среде (черные точки) и в вакууме (серые квадраты)

### Литература

1. *W.S. Yang [et al.]*. High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange // *Sci. Rep.* 2015. V. 348. P. 1234–1237.
2. *Jun Hong Noh [et al.]*. Chemical Management for Colorful, Efficient, and Stable Inorganic-Organic Hybrid Nanostructured Solar Cells // *Nano Letters*. 2013. N 13(4). P. 1764–1769.

УДК 537.9

### Особенности распределения электронной плотности в халькогенидах висмута, пниктидах железа, купратах и в родственных им сверхпроводниках

*Г.С. Сергеев<sup>1</sup>, В.Г. Орлов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

С целью выявления особенностей в распределении электронной плотности, которые могут приводить к появлению неустойчивостей в электронной подсистеме



сверхпроводников, содержащих в своем составе железо или медь (псевдощели, зарядовые, спиновые или орбитальные страйпы, нематические нарушения вращательной симметрии), а также для классификации природы их химической связи были проведены расчеты электронной зонной структуры халькогенидов висмута и железа  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{FeSe}$ , оксида висмута  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ , пниктидов железа  $\text{LaFeAsO}$ ,  $\text{SmFeAsO}$ ,  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{LiFeAs}$  и купратов  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ .

Для расчета электронной зонной структуры перечисленных выше соединений использовался пакет программ WIEN2k [1]. Исследование особенностей в распределении электронной плотности  $\rho(r)$ , полученной с помощью WIEN2k, производилось с помощью программы Critic2 [2], которая разработана для топологического анализа скалярных полей в периодических структурах на основе метода QTAIM (The Quantum Theory of Atoms in Molecules) [3]. Вычисления проводились на многоцелевом вычислительном комплексе НИЦ «Курчатовский институт» [4].

Точки  $r_c$ , в которых градиент электронной плотности обращается в ноль, называются критическими. Для классификации критических точек используются собственные значения  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) матрицы вторых производных электронной плотности по координатам, называемой *матрицей Гессе*. Критические точки характеризуются двумя величинами ( $\omega$ ,  $\sigma$ ): рангом  $\omega$  — числом ненулевых собственных значений матрицы Гессе и сигнатурой  $\sigma$  — алгебраической суммой их знаков. В QTAIM выделено четыре типа критических точек [3]: локальные максимумы электронной плотности на ядре, называемые *nucleus* с параметрами (3, -3), локальные минимумы (3, +3), носящие название клетки (*cages*), и два типа седловых точек — кольца (*rings*) и связи (*bonds*) с параметрами (3, +1) и (3, -1) соответственно. Для классификации химических связей главным образом, используют параметры критических точек типа *bond*: знак и величину лапласиана электронной плотности, отношение  $|\lambda_{1,2}|/\lambda_3$ , величину электронной плотности  $\rho(r)$  и характер распределения  $\rho(r)$  в межатомной области. В частности, ковалентная связь характеризуется отрицательным знаком лапласиана электронной плотности, отрицательными значениями  $\lambda_{1,2} < 0$ , большими по абсолютной величине  $|\lambda_{1,2}| > \lambda_3$ , большим значением электронной плотности в критической точке  $\rho_b$ .

В результате проведенных расчетов было получены следующие результаты.

1. Выявленные критические точки в распределении электронной плотности указанных выше четырех типов для всех исследованных соединений располагаются в точках высокой симметрии (так называемых Wyckoff positions) кристаллической структуры.
2. Параметры критических точек типа *bond* в распределении электронной плотности халькогенидов висмута, оксида висмута, пниктидов железа, а также высокотемпературных сверхпроводников (положительные значения лапласиана электронной плотности, заметные величины  $\rho_b$ , полуметаллический характер распределения электронной плотности в межатомных областях кристалла) не позволяют отнести вышеперечисленные соединения к веществам как с ионным, так и с ковалентным типами связи. Положительный знак лапласиана электронной плотности свидетельствует о выталкивании заряда из областей критических точек типа *bond* и о существенной роли флуктуаций зарядовой плотности в сверхпроводниках, содержащих атомы железа и меди, а также в родственных им соединениях.
3. В сверхпроводниках и исходных для их получения соединениях была обнаружена корреляция между температурой сверхпроводящего перехода  $T_c$  и величиной лапласиана электронной плотности в критических точках типа *bond* с наибольшей величиной электронной плотности  $\rho_b$ , представленная на рис. 1. Рис. 1 следует рассматривать как качественный тренд, поскольку величина  $T_c$  существенным образом зависит от числа носителей заряда, которые могут быть изменены несколькими способами: подбором оптимального легирования, применением внешнего или химического давления, отжигом в атмосфере кислорода или аргона. Кроме того, что более важно, значение  $T_c$  должно быть непосредственно связано с механизмом

высокотемпературной сверхпроводимости, который активно обсуждается в настоящее время. Тем не менее, найденная в работе корреляция может использоваться как для поиска новых сверхпроводников с высокими значениями  $T_c$ , так и для объяснения природы сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-32-00107.

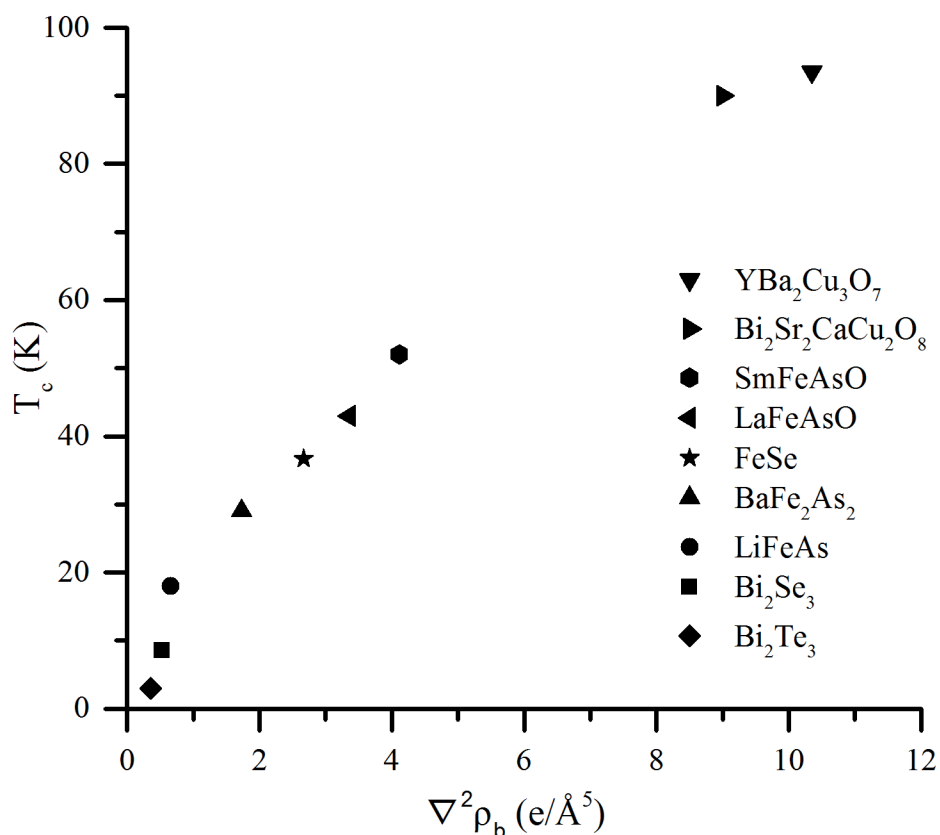


Рис. 1. Корреляция между  $T_c$  и величиной лапласиана электронной плотности в критических точках типа *bond* с наибольшим значением  $\rho_b$  в рассмотренных в работе сверхпроводниках

### Литература

1. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J. WIEN2k: An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. Austria: Techn. Universität Wien, 2001.
2. Otero-de-la-Roza A., Johnson E.R., Luña V. CRITIC2: A program for real-space analysis of quantum chemical interactions in solids // Comp. Phys. Commun. 2014. V. 185. P. 1007.
3. Bader R.F.W. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. International Series of Monographs on Chemistry 22. Oxford Science Publications, 1990.
4. <http://ckp.nrcki.ru/>

## Практическая реализация метода «3-омега» для исследования теплопроводности тонких плёнок

*Д.А. Чернодубов, А.В. Инюшкин*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В современной науке и технике широко распространено использование материалов в виде тонких плёнок. Одна из основных возникающих при этом проблем заключается в том, что для расчётов теплопроводящих свойств плёнок нельзя использовать справочные данные, полученные на объёмных образцах из-за их различия; классические методы измерения теплопроводности при этом не дают удовлетворительных результатов на тонких плёнках. Поскольку точное и полное знание свойств материалов, используемых для построения элементов, деталей и схем, критически важно для обеспечения работоспособности и повышения их эффективности, измерение теплопроводности тонких плёнок является важной задачей для обеспечения контроля качества при создании новых материалов микроэлектроники.

Основы метода «3-омега» были предложены и теоретически обоснованы Д.Г. Кэхиллом [1], но в нашей стране мы реализуем его впервые. Созданная нами установка «3-омега» позволяет проводить измерения теплопроводности различных материалов, в том числе тонких плёнок, с более высокой точностью, чем другие доступные на данный момент методики.

В используемом нами методе для вычисления теплопроводности образца анализируется его температурный отклик на поверхности при воздействии на него переменного теплового потока.

Для проведения измерений поверхность образца (латеральных размеров около нескольких миллиметров) полируется и на нее методом фотолитографии наносится тонкая (около 100 нм толщиной) пленка металла (Au, Al) в виде полоски длиной 3–5 мм и шириной порядка 10 мкм. К полоске присоединяются токовые и потенциальные контакты. Полоска служит одновременно и нагревателем образца, и малоинерционным термометром для измерения температуры на поверхности образца.

Название метода происходит из того, что температурный отклик возникает в чистом виде на третьей гармонике электрического тока, пропускаемого через нагреватель-термометр.

По сравнению с другими методиками измерения теплопроводности метод «3-омега» обладает следующими преимуществами:

- возможность проведения измерений на экспериментальных образцах разных размеров, начиная от плёнок толщиной порядка 100 нм;
- возможность проведения измерений тканей организмов и других мягких материалов;
- проведение измерений в широком диапазоне температур от 10 до 1000 К;
- уменьшенные паразитные потери тепла с нагревателя-термометра позволяют получать точные величины теплопроводности при высоких температурах.

### Литература

1. Cahill D.G. Thermal conductivity measurement from 30 to 750 K: the 3 $\omega$  method // Rev. Sci. Instrum. 1990. V. 61. P. 802.

УДК 621.315.592

## Проводимость и фотопроводимость тонких пленок полимера - производного полифенилхинолина

*Ш.Р. Саитов<sup>1</sup>, Д.В. Амасев<sup>2</sup>, А.Р. Тамеев<sup>3</sup>, В.В. Малов<sup>3</sup>, В.М. Светличный<sup>4</sup>,  
Л.А. Мяжкова<sup>4</sup>, А.Г. Казанский<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

<sup>3</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

<sup>4</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН

Полимеры класса полифенилхинолина (ПФХ) обладают фотопроводимостью в области энергий больших 2.8 эВ [1]. В свою очередь, молекулы, содержащие фрагмент 2,1,3-бензотиадиазола (БТДЗ, рис. 1), хорошо известны как органические полупроводники, имеющие относительно малое энергетическое расстояние (1.8 эВ) между уровнями высшей заполненной молекулярной орбитали (ВЗМО или НОМО (англ.)) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО или LUMO (англ.)) [2], [3]. В частности, было установлено, что создание смеси ПФХ с молекулами БТДЗ приводит к уширению спектральной области фотопроводимости композита ПФХ и возрастанию фототока в несколько раз [4]. Это связано с образованием комплекса между электронодонорными фрагментами ПФХ и электроноакцепторными молекулами БТДЗ. При этом молекулы БТДЗ в композите, по-видимому, служат центрами прыжкового транспорта электронов.

В представляемой работе проведены измерения проводимости и спектральных зависимостей фотопроводимости ПФХ, содержащего звено БТДЗ в основной цепи. Пленки ПФХ толщиной около 0.7 мкм были получены поливом раствора ПФХ в трифторуксусной кислоте на стеклянную подложку с последующим центрифугированием подложки (spin coating) при комнатной температуре.

Для измерения темновой проводимости ( $\sigma$ ) и фотопроводимости ( $\Delta\sigma$ ) пленок на их поверхность были нанесены контакты из Al с расстоянием между ними 1 мм. Измерения были выполнены в области линейности вольт-амперных зависимостей ( $U < 20$  В). Проведенные в вакууме ( $10^{-4}$  Па) измерения температурных зависимостей  $\sigma$  показали, что в области температур 294–370 К изменение  $\sigma$  с температурой хорошо описывается как экспоненциальной зависимостью  $\sigma(T) = A \cdot \exp[-E_a/(k_B T)]$  с энергией активации  $E_a \sim 0.9$  эВ (рис. 2а), так и законом Мотта для прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка  $\sigma(T) = A \cdot \exp[-(T_0/T)^{1/4}]$  [5] (рис. 2б). Активационная зависимость  $\sigma(T)$ , представленная на рис. 2а, может возникать при переносе носителей заряда по делокализованным состояниям в случае расположения уровня Ферми в запрещенной зоне на глубине 0.9 эВ от данных состояний. В то же время, по нашему мнению, перенос носителей заряда в исследованном полимере определяется прыжковым переносом по локализованным состояниям, о чем свидетельствуют результаты, представленные на рис. 2б.

Спектральная зависимость фотопроводимости, измеренная при комнатной температуре, и нормированная на число падающих квантов  $N$ , представлена на рис. 3. «Излом» на спектральной зависимости  $\Delta\sigma$  свидетельствует о наличии в исследованном полимере края поглощения и, соответственно, запрещенной зоны величиной 1.8–1.9 эВ. В области энергий 1.4–1.8 эВ фотопроводимость экспоненциально возрастает с энергией кванта,  $\Delta\sigma(h\nu) \sim \exp(h\nu/E_U)$ . Это указывает на существование в спектре поглощения «хвоста Урбаха» с характерной энергией  $E_U = 0.062$  эВ, определяемой экспоненциальным распределением плотности локализованных состояний в запрещенной зоне исследованного полимера.

Таким образом, полученные результаты указывают на то, что фрагмент БТДЗ расширяет область поглощения ПФХ в красную область. При этом проводимость материала определяется прыжковым переносом носителей заряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-29-06423).

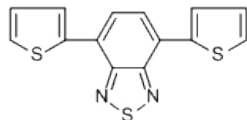


Рис. 1. Формула БТДЗ

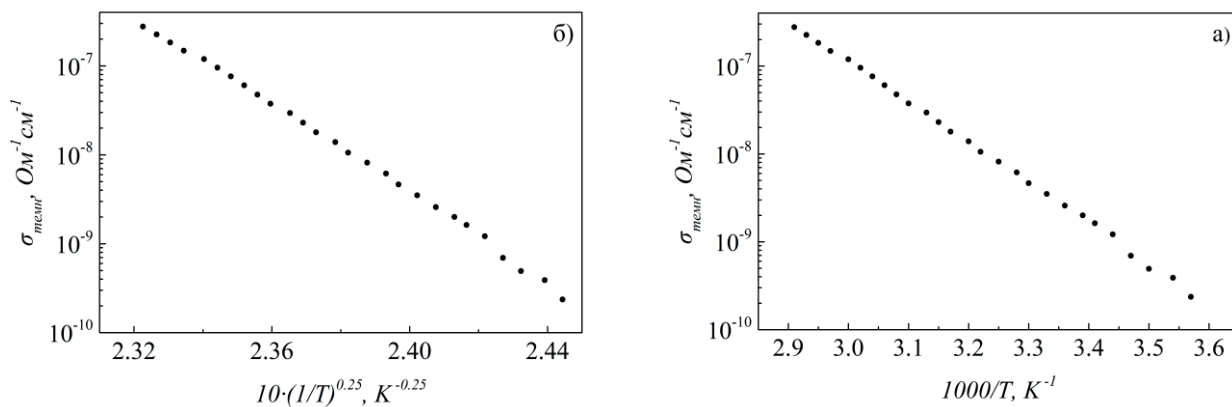


Рис. 2. Температурные зависимости темновой проводимости

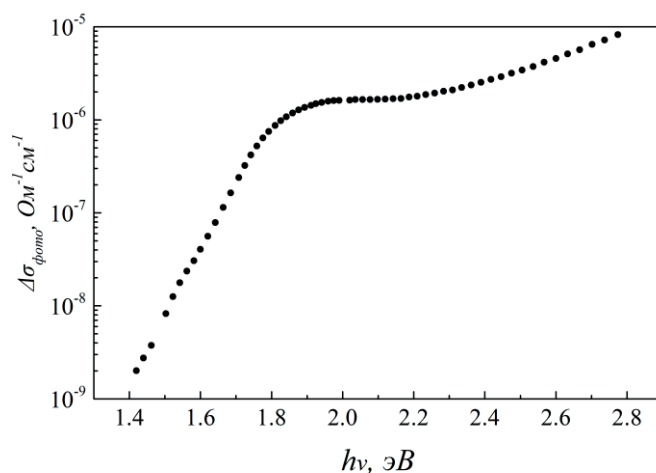


Рис. 3. Спектральные зависимости фотопроводимости

### Литература

1. Светличный В.М., Александрова Е.Л., Мягкова Л.А., Матюшина Н.В., Некрасова Т.Н., Смыслов Р.Ю., Тамеев А.Р., Степаненко С.Н., Ванников А.В., Кудрявцев В.В. Фото- и электрофизические свойства полифенилхинолинов, содержащих фрагменты карбазола или индоло[3,2-б]карбазола – новых материалов для оптоэлектроники // Физика и техн. полупроводн. 2011. Т. 45, № 10. С. 1392–1398.
2. Inganäs O., Svensson M., Zhang F., Gadisa A., Persson N.K., Wang X., Andersson M.R. Low bandgap alternating polyfluorene copolymers in plastic photodiodes and solar cells // Appl. Phys. A. 2004. V. 79, N 1. P. 31–35.
3. Park S.H., Roy A., Beauprè S., Cho S., Coates N., Moon J.S., Moses D., Leclerc M., Lee K., Heeger A.J. Bulk heterojunction solar cells with internal quantum efficiency approaching 100% // Nature Photonics. 2009. V. 3, N 5. P.297–302.
4. Александрова Е.Л., Светличный В.М., Матюшина Н.В., Мягкова Л.А., Кудрявцев В.В., Тамеев А.Р. Сенсibilизация фотоэффекта в карбазол- индолокарбазол содержащих

полифенилхинолинах акцепторными молекулами бензотиадиазола // Физика и техн. полупроводн. 2014. Т. 48, № 11. С.1517-1520.

5. *Mott N.F.* Conduction in Non-Crystalline Materials. Oxford: Clarendon Press, 1987. 128 с.

УДК 539.123

## Сила отдачи от нейтринного излучения при захвате электронов поляризованными ядрами

*А.Л. Барабанов<sup>1,2</sup>, О.А. Титов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

В процессе захвата электрона ядром высвобождается энергия, которая распределяется между электронным нейтрино и ядром отдачи. Кинетическая энергия, приобретаемая ядром отдачи, очень мала, поэтому если исходные атомы располагались в радиоактивном образце, то и дочерние атомы будут оставаться там же. Вероятность взаимодействия нейтрино с образцом крайне мала, поэтому нейтрино будут уносить из образца энергию и импульс. В результате на радиоактивный образец в целом эффективно будет действовать макроскопическая сила отдачи.

Эта сила определяется импульсом, уносимым нейтрино в единицу времени. Направление уносимого импульса зависит от углового распределения нейтрино, а его абсолютная величина – от энергии и массы нейтрино. Если нейтрино испускаются изотропно, то сила равна нулю. В слабых взаимодействиях пространственная чётность не сохраняется, поэтому если исходные ядра поляризованы, то угловое распределение нейтринного излучения будет асимметричным и на образец будет действовать ненулевая сила.

Авторы работы [1] оценили силу отдачи, действующую на образец, при условии, что ядра атомов, неустойчивых к электронному захвату, подвергаются поляризации в сильном магнитном поле при низкой температуре. Эта сила оказалась сравнимой с теми, которые измеряются современными атомно-силовыми микроскопами. Эти же авторы рассмотрели возможности использования этого метода для определения массы нейтрино [2].

В работах [1], [2] рассмотрен лишь случай гамов-теллеровского перехода с уменьшением спина ядра на единицу. При этом не было использовано явное выражение для асимметрии вылета нейтрино по отношению к вектору спина ядра, захватывающего электрон (соответственно, сила отдачи была получена с точностью до численного множителя).

В данной работе выведена точная формула для силы отдачи в произвольном разрешённом переходе (как фермиевском, так и гамов-теллеровском) с учётом углового распределения нейтрино, испускаемого в процессе захвата электрона поляризованным ядром. Кроме того, показано, что полученная в работе [3] зависимость углового распределения нейтрино от степени поляризации ядер является ошибочной.

Мы также обсуждаем дополнительные возможные методы измерения силы отдачи от нейтринного излучения. В частности, предлагается за счёт ядерного магнитного резонанса изменять направление поляризации распадающихся ядер, меняя тем самым направление силы отдачи.

### Литература

1. *DeAngelis C., Folan L.M., Tsifrinovich V.I.* Generation and monitoring of directed neutrino beams using electron-capture  $\beta$ -decay sources // *Phys. Rev. C.* 2012. V. 86. P. 034615.
2. *Folan L.M., Tsifrinovich V.I.* Generation of a directed mono-energetic neutrino beam and measurement of the neutrino mass // *Mod. Phys. Lett. A.* 2014. V. 29. P. 1430042.



## Характерные температуры метамагнитоструктурного фазового перехода в сплавах Гейслера системы Ni-Mn-In

*А.В. Маширов, В.В. Колецов, А.П. Каманцев, В.Г. Шавров*

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Целью настоящей работы явилась проверка широко принятого в литературе представления [1] о том, что температура структурного фазового перехода, который в семействе сплавов Гейслера Ni-Mn-X (X = Sn, In, Ga) может сливаться с метамагнитным фазовым переходом, определяется на тройной фазовой диаграмме главным образом концентрацией свободных электронов  $e$ . Были изготовлены две серии образцов, которые имели составы, которые были бы наиболее характерными для проверки этой гипотезы: образцы «вертикальной» серии (6 образцов), для которых параметр  $e$  примерно постоянен и равен 7.82, а для второй «горизонтальной» (6 образцов) параметр  $e$ , наоборот, наиболее резко изменяется от 7.05 до 8.28.

Концентрация свободных электронов в ячейке сплава Ni-Mn-In рассчитывается по формуле:  $e = 10C_{Ni} + 7C_{Mn} + 3C_{In}$ , где  $C_{Ni}$  – атомная концентрация никеля в сплаве Ni-Mn-In,  $C_{Mn}$  – атомная концентрация марганца,  $C_{In}$  – атомная концентрация индия.

Первая «вертикальная» серия подобрана таким образом, чтобы в ней концентрация свободных электронов  $e$  была постоянна, а вторая серия так, чтобы  $e$  изменялось максимально при постоянном параметре  $\mu$ . Формальный параметр  $\mu$  в свою очередь равен  $2,12C_{Ni} + C_{Mn} + 2C_{In} = 1.65$ . Геометрические места точек на плоской диаграмме тройного сплава, отвечающие постоянным параметрам  $e = \text{const}$  и  $\mu = \text{const}$ , – перпендикулярные прямые, задающие на тройной диаграмме декартову систему координат. В работе выбрано, что пересечению прямых  $e = 7.82$  и  $\mu = 1.65$  отвечает сплав  $Ni_{45,5}Mn_{40,5}In_{14}$ . Композиции остальных изготовленных сплавов лежат в интервале параметров  $e$ ,  $\mu$ :  $7.05 < e < 8.28$ ,  $\mu = 1.65$  и  $e = 7.82$ ,  $1.59 < \mu < 1.87$ .

Если проанализировать данные о фазовом переходе в сплавах Гейслера Ni-Mn-In в зависимости от параметров  $e$  и  $\mu$ , то анализ совокупности этих данных опровергает предположение о том, что температура метамагнитоструктурного перехода определяется только параметром  $e$ . При  $e = 7.82$  зависимость температуры Кюри слабая, зависимость температуры мартенситного перехода от параметра  $\mu$  резко немонотонна (рис. 1). При минимальных исследованных значениях  $1.59 < \mu < 1.67$  с увеличением  $\mu$  наблюдается уменьшение температуры метамагнитоструктурного превращения, далее при  $1.67 < \mu < 1.69$  метамагнитоструктурный переход исчезает, остается только фазовый переход ферромагнетик–парамагнетик, при  $1.69 < \mu < 1.73$  метамагнитоструктурный переход проявляет себя вновь, а при дальнейшем увеличении ( $\mu > 1.73$ ) опять исчезает, остается только точка Кюри, которая снижается при увеличении  $\mu$ . Обратим внимание на резкий немонотонный характер зависимости. На сегодняшний день остается открытым вопрос о поведении фазовой диаграммы в областях, обозначенных штриховыми линиями на рис. 1. В частности, предстоит выяснить, как происходит исчезновение перехода: непрерывно, снижением до абсолютного нуля или скачкообразно, при некотором значении температуры и параметра  $\mu$ .

Можно предположить наличие в сплавах Гейслера системы Ni-Mn-In такого критического состояния вещества в вершинах параболических зон, при котором будет наблюдаться метамагнитоструктурный фазовый переход, индуцированный малым магнитным полем или механическим напряжением. С данной гипотезой можно связать перспективу дальнейшего изучения физических свойств сплавов Гейслера системы Ni-Mn-In.

Нестехиометрические составы на основе тройной системы Ni-Mn-In формируют области различных свойств сплавов. Введение параметров  $e$  и  $\mu$  в данной работе представляет попытку заменить три зависимых параметра компонентов тройного сплава Ni, Mn, In на два независимых.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект №14-22-00279).

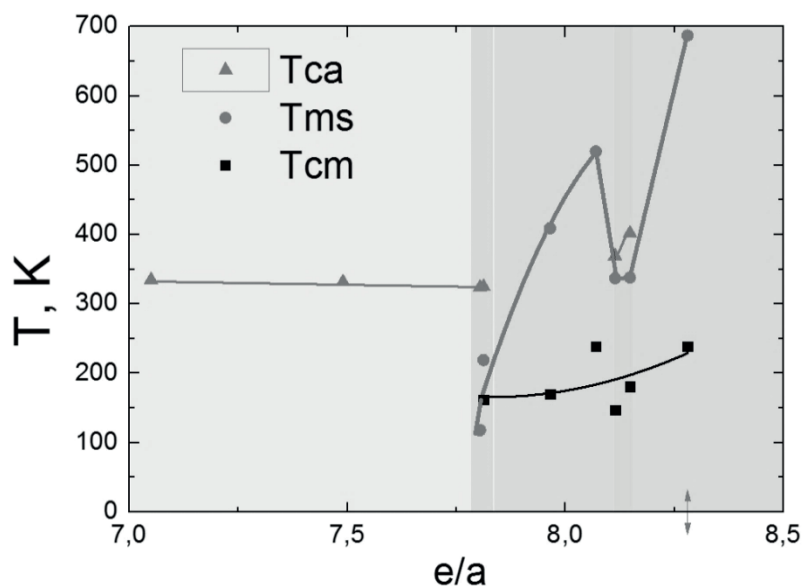


Рис. 1. Зависимость температуры (ось ординат) начала мартенситного перехода  $T_{Ms}=M_s$ , температуры Кюри аустенитной фазы  $T_{ca}$  и температуры Кюри мартенситной фазы  $T_{cm}$  от параметра  $e$  (ось абсцисс) в сплавах Гейслера семейства Ni-Mn-In при постоянном значении  $\mu = 1,4$

#### Литература

1. Zarinejad M., Liu Y. Dependence of transformation temperatures of shape memory alloys on the number and concentration of valence electrons. Hauppauge: Nova Science Publishers, 2010. 339 p.





Научное издание

Труды  
60-й Всероссийской научной конференции МФТИ

**Нано-, био-, информационные, когнитивные  
и социогуманитарные науки и технологии**

20-26 ноября 2017 года

Составители:

*М.В. Милов, В.Г. Орлов*

Редакторы:

*В.А. Дружинина, И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева*

Корректоры:

*И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева*

Набор и вёрстка:

*М.А. Чайковский*

Подписано в печать 12.12.2017. Формат 60 × 84 <sup>1</sup>/<sub>8</sub>.

Усл. печ. л. 6,25. Тираж 40 экз. Заказ № 608.

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»

141707, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

Тел. (495)408-58-22

---

"Полиграфия "ПРОДВИЖЕНИЕ"  
123592, г. Москва, ул. Кулакова дом 20, стр. 1Б  
E-mail: info@prodv.pro  
Тел. (495) 988-93-68





ISBN 978-5-7417-0655-8



9 785741 706558